



HAL
open science

Dimères classiques en interaction & Autres problèmes en magnétisme quantique

Fabien Alet

► **To cite this version:**

Fabien Alet. Dimères classiques en interaction & Autres problèmes en magnétisme quantique. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paul Sabatier (Toulouse 3), 2016. tel-01798214v1

HAL Id: tel-01798214

<https://theses.hal.science/tel-01798214v1>

Submitted on 3 Jun 2018 (v1), last revised 31 Jul 2018 (v3)

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

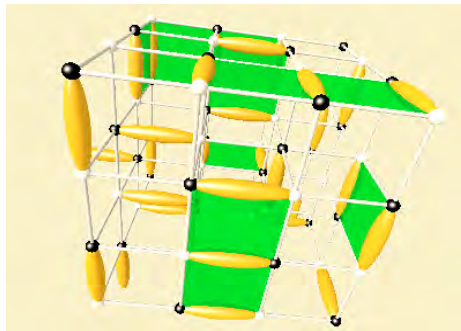


Distributed under a Creative Commons Attribution - NonCommercial - NoDerivatives 4.0
International License

Mémoire présenté à l'Université de Toulouse 3
en vue de l'obtention de l'Habilitation à Diriger des Recherches
Discipline : Physique
Spécialité : Sciences de la Matière, Physique Théorique

Fabien Alet

Dimères classiques en interaction & Autres problèmes en magnétisme quantique



soutenance le 11 février 2016
au Laboratoire de Physique Théorique de Toulouse, France

Membres du jury

Peter Holdsworth (rapporteur)
Werner Krauth (rapporteur)
Régis Mélin (rapporteur)
Benoît Douçot (examinateur)
Nicolas Dupuis (examinateur)
Pierre Pujol (examinateur)

Résumé

Ce mémoire en vue d'obtenir l'habilitation à diriger des recherches présente une grande partie de mes travaux de recherche effectués depuis environ 10 ans dans le domaine du magnétisme quantique et de la physique statistique. Un accent particulier et pédagogique a été mis sur la présentation d'une classe de modèles de physique statistique classique : les modèles de dimères en interaction. La première partie composée de quatre chapitres étudie les modèles bidimensionnels. Après une introduction aux pavages de dimères en deux dimensions, un modèle de dimères en interaction sur le réseau carré est présenté. Son diagramme de phase est ensuite étudié par des simulations numériques (Monte Carlo et matrice de transfert) et une analyse en théorie des champs (gaz de Coulomb) : une phase haute température critique est séparée d'une phase ordonnée par une transition Kosterlitz-Thouless. Enfin, plusieurs extensions du modèle originel et leurs analyses sont présentées. La deuxième partie (quatre chapitres) est consacrée à l'étude de la même famille de modèles en trois dimensions. La physique se révèle plus riche avec une phase de Coulomb et une transition de phase non-conventionnelle, défiant la théorie standard de Ginzburg-Landau. Une théorie des champs est proposée pour la description du point critique, reliant ce problème à une autre classe de transitions de phase quantiques dite déconfinées.

La troisième partie plus courte (deux chapitres) effectue une synthèse d'autres travaux dans le domaine du magnétisme quantique : y sont évoquées notamment l'étude quantitative de systèmes magnétiques en basse dimension (en relation avec les expériences), la physique des liens de valence, des points critiques quantiques déconfinés ou encore des contributions sur la relation entre théories de l'information quantique et de la matière condensée. Une brève description de projets de recherche à venir complète ce mémoire.

Abstract

This habilitation thesis presents my research activity since about 10 years in quantum magnetism and statistical physics. A particular and pedagogical emphasis is given on the study of a class of statistical mechanics models : interacting dimer models. The first part of this thesis (four chapters) is dedicated to 2d models. After an introduction to dimer coverings in two dimensions, a model of interacting dimers on the square lattice is introduced. Its phase diagram is then studied using numerical simulations (Monte Carlo and transfer matrix) as well as field theory (Coulomb gas): a high-temperature critical phase is separated from an ordered phase by a Kosterlitz-Thouless transition. Several extensions of the original model and their analysis are also presented.

The second part (four chapters) deals with the same family of models in three dimensions. The physics is richer, with the occurrence of a Coulomb phase and of an unconventional phase transition which defies the standard Ginzburg-Landau theory. A field theory is proposed for the critical point, relating this problem to another class of quantum phase transitions, the so-called deconfined quantum critical points.

The final shorter part (two chapters) summarizes other research activities in quantum magnetism. We discuss there the quantitative study of magnets in low dimension (in relation with experiments), valence bond physics, deconfined quantum critical points and contributions to the relation between quantum information and condensed matter theories. A short description of future research projects closes this thesis.

Avant-propos

Ce mémoire en vue d'obtenir l'habilitation à diriger des recherches présente une grande partie de mes travaux de recherche effectués depuis environ 10 ans (de fin 2004 à fin 2014). Je l'ai décomposé en trois grandes parties : les deux premières présentent l'étude détaillée d'une famille de modèles de physique statistique classique, les modèles de dimères en interaction. La troisième partie présente une synthèse de mes autres activités de recherche, autour du magnétisme quantique.

Bien que la physique statistique classique occupe une part faible de mes recherches, j'ai choisi de mettre l'accent sur les modèles de dimères en interaction pour deux raisons principales. Tout d'abord, il s'agit d'un problème de physique très riche, universel, portant des connections au départ insoupçonnées et peu connues avec d'autres problèmes de matière condensée quantique : ce sujet méritait une revue. Ensuite et plus prosaïquement, il s'agit vraiment d'un thème « personnel » de recherche, pour lequel j'ai eu les premières idées au début de mon second post-doctorat (fin 2004), et que j'ai porté durant plusieurs années (jusqu'en 2010 environ).

Les deux premières parties de ce mémoire sont écrites de façon pédagogique et détaillée, dans l'esprit d'une thèse. La [Partie I](#) sur les modèles bidimensionnels et la [Partie II](#) sur les modèles tridimensionnels présentent des physiques différentes et à ce titre peuvent être considérées comme indépendantes, mais il est clair que le lecteur préférera les lire dans l'ordre. Ce mémoire ayant été finalisé début 2016, plusieurs travaux récents n'y sont pas présentés. Je pense notamment aux publications [[NAHUM15B](#),[WANG17](#),[SREJITH18](#)], qui sont particulièrement pertinentes pour les questions évoquées dans la [Partie II](#).

Afin d'éviter d'alourdir l'ensemble, la [Partie III](#) sur mes autres activités de recherche est plus concise (dans l'esprit d'une HDR) et peut se lire indépendamment. Cette partie contient aussi une présentation de certains projets de recherche, avec l'accent mis en particulier sur le problème de la localisation à N corps.

Remerciements

Quelques lignes ne suffisent pas pour remercier l'ensemble des personnes m'ayant permis de finaliser ce mémoire. Tout d'abord, les travaux présentés n'auraient pas pu voir le jour sans tous mes collaborateurs sur ces sujets, que je remercie très chaleureusement. Une mention particulière à Grégoire et Vincent, pour tout ce que j'ai appris à leurs côtés pour les travaux des deux premières parties. Ensuite, je souhaite associer à ces remerciements l'ensemble de mes collègues au LPT, collaborateurs ou non, juniors ou seniors, pour l'ambiance chaleureuse de travail au jour le jour. Enfin, je suis très reconnaissant envers les membres du jury pour avoir pris le temps de lire un mémoire un peu trop long et d'avoir accepté de le juger. Sans aucune surprise, mes autres remerciements restent privés !

PARTIE 1 :

Dimères classiques en deux dimensions

Cette première partie concerne la physique de modèles de dimères en deux dimensions, lorsque ceux-ci sont soumis à des interactions. Il s'agit d'un problème simple, bien posé, et pour lequel la majorité des outils standards (analytiques ou numériques) de la physique statistique est disponible. Assez étrangement et bien qu'il existe de nombreuses motivations physiques pour le faire, ce problème n'avait (pratiquement) pas été étudié auparavant. La solution de ce problème et de ses diverses variantes permet notamment d'introduire de façon simple le formalisme du gaz de Coulomb, que l'on retrouve dans de nombreux problèmes en deux dimensions.

Le [Chapitre I](#) constitue une introduction pédagogique au problème de pavages de dimères bidimensionnels et à ses diverses motivations. Sont définies les caractéristiques essentielles pour la description de ces pavages (bipartité du réseau, hauteur) ainsi que les techniques de simulations de ce type de problèmes. Ce chapitre contient la définition du modèle étudié sur le réseau carré. Celui-ci est étudié en grand détail par des simulations Monte Carlo dans le [Chapitre II](#), permettant de tracer numériquement son diagramme de phase. L'analyse théorique de ces résultats est formulée dans le [Chapitre III](#) en termes du gaz de Coulomb, qui bien que non-exact à l'échelle du réseau, capture entièrement la physique à longue distance. Cette analyse est corroborée par des calculs par matrice de transfert. Le dernier [Chapitre IV](#) de cette partie effectue une revue de plusieurs variantes introduites au cours des années. La description des différents résultats obtenus sur ces variantes est grandement facilitée par la compréhension physique introduite dans les chapitres précédents.

Chapitre I. Un modèle simple de physique statistique

Ce chapitre constitue une introduction pédagogique à la physique statistique des dimères en deux dimensions. Après une brève présentation des motivations physiques pour étudier les modèles de dimères, nous donnons les principaux résultats connus sur les pavages de dimères, tout en donnant les concepts physiques essentiels. Le modèle de dimères en interaction qui sera étudié en détail dans les deux prochains chapitres est introduit, ainsi que les méthodes numériques qui permettront de le simuler.

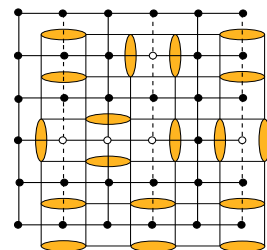
I.1. Pourquoi les dimères classiques ?

Quelles sont les motivations physiques pour étudier des problèmes de dimères classiques ? Historiquement, la proposition de poser des dimères sur un réseau a été effectuée pour la première fois dans les années 30 [ROBERTS35, FOWLER37], comme un modèle simple pour l'adsorption de molécules diatomiques sur des surfaces cristallines. La façon d'énumérer le nombre de pavages par de tels dimères d'un réseau plan a formé ensuite un résultat célèbre de la physique statistique des années 60. Ce sont les méthodes de Pfaffien développées par KASTELEYN, TEMPERLEY et FISHER [KASTELEYN61, TEMPERLEY61, FISHER61] qui ont permis les premières d'effectuer ce calcul. C'est depuis devenu un problème standard en physique statistique qui a aussi attiré l'attention de la communauté mathématique, notamment en ce qui concerne la justification rigoureuse des solutions dans le continu [KENYON09].

La connexion avec les modèles de magnétisme explique aussi la grande popularité des modèles de dimères. Il existe en effet de nombreuses routes qui amènent chacune indépendamment à ce type de modèle. Une de ces routes est la connexion formelle établie dans les années 60 avec la solution du modèle d'Ising en deux dimensions [FISHER66] par les méthodes de Pfaffiens.

Un autre chemin est celui du magnétisme frustré *classique*. Les contraintes locales imposées par la frustration se traduisent dans certains cas en une description par des dimères de cœur dur, où chaque site d'un réseau (en général le dual) doit être occupé par un et seul dimère. C'est le cas par exemple de modèles entièrement frustrés (*fully frustrated*), comme le modèle d'Ising antiferromagnétique sur le réseau triangulaire, ou le modèle ferromagnétique avec une ligne de liens sur deux frustrés antiferromagnétiquement (Fig. 1). Dans ces cas, chaque plaquette élémentaire est frustrée, dans le sens où l'on ne peut trouver de configuration de spins satisfaisant les contraintes magnétiques. Les configurations qui minimisent l'énergie ont nécessairement un lien frustré par plaquette et en dessinant un trait (un dimère) per-

Fig. 1 Un fondamental du modèle d'Ising *fully frustrated* sur le réseau carré, et sa représentation en termes d'un pavage de dimères. Les liens en trait continu sont ferromagnétiques, les liens en tirets sont antiferromagnétiques. Les cercles blancs et noirs représentent respectivement des spins *up* et *down*. Les dimères qui vivent sur le réseau dual (situé au centre des plaquettes du réseau réel) coupent les liens frustrés dans la configuration de spin. Ici et par la suite, tous les pavages de dimères seront considérés sur des réseaux avec conditions aux bords périodiques.



pendiculairement à chaque lien frustré, on s’aperçoit que l’on pave le réseau dual avec ces dimères de cœur dur. Plus généralement, l’ensemble des pavages de dimère est en correspondance simple avec l’ensemble extensif de fondamentaux de tels modèles entièrement frustrés¹. La même situation apparaît pour des modèles à symétrie continue, comme le modèle XY sur le réseau kagome [HUSE92].

Une autre piste pour arriver aux modèles de dimères est celle du magnétisme quantique. Les dimères vont représenter cette fois le singulet $1/\sqrt{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ formé par deux spins $1/2$ sur des sites plus proches voisins. Dans certains modèles antiferromagnétiques, les spins préfèrent s’organiser en singulets locaux plutôt que de former un état ordonné magnétiquement. Ceci peut être mis en place de façon formelle par un développement en termes de l’amplitude $x = 1/\sqrt{2}$ des singulets pour un modèle de spins $1/2$ réaliste comme le modèle d’Heisenberg [ROKHSAR88, SCHWANDT10]. Les premiers termes d’un tel développement correspondent au modèle de dimères quantiques ayant pour Hamiltonien (sur le réseau carré) :

$$H_{\text{QDM}} = -t \sum_{\square} (|\text{img1}\rangle\langle\text{img2}| + |\text{img3}\rangle\langle\text{img4}|) + v \sum_{\square} (|\text{img5}\rangle\langle\text{img6}| + |\text{img7}\rangle\langle\text{img8}|). \quad \text{Éq. (1)}$$

Ici, comme précédemment, les configurations admises (de l’espace de Hilbert) sont des pavages de dimères, mais les dimères ont cette fois-ci une dynamique quantique propre donnée par H_{QDM} . Les deux termes du Hamiltonien agissent sur les plaquettes du réseau carré : le premier terme cinétique est hors diagonal et « flippe » une plaquette, alors que le second terme potentiel est diagonal et compte le nombre de plaquettes « flippables ». Nous reviendrons sur ces notions et le diagramme de phase de H_{QDM} plus tard. Pour le point Rokhsar-Kivelson (RK) $v = t$, le fondamental s’écrit comme la somme à poids égal de toutes les configurations de dimères [ROKHSAR88], *i.e.* le problème de dénombrement résolu dans les années 60. Des modèles classiques ou quantiques de dimères peuvent aussi émerger d’autres représentations de problèmes de magnétisme quantique, comme par exemple un développement suivant l’anisotropie sur site pour des systèmes de spins quantiques à grande valeur de spin $S > 1$ [SEN08, SEN09], ou encore comme modèle effectif pour expliquer la mise en ordre de spins en interaction dipolaire sur le réseau kagome [CHERN11].

Comme souvent, l’histoire scientifique fait une boucle et une dernière motivation récente vient de la physique de l’adsorption, comme dans les années 30. Cette fois-ci, il s’agit non plus de molécules diatomiques mais de molécules organiques complexes (l’acide tétracarboxylique p-terphényle-3,5,3’,5’) adsorbées sur une surface de graphite. Le positionnement des groupes d’acide carboxylique est stabilisé par liaison hydrogène entre les molécules et peut s’effectuer de deux manières différentes le long des liens du substrat. Au final, les molécules s’organisent comme des pavages de dimères sur le réseau hexagonal sous-jacent, et ces pavages peuvent être imagés directement par microscopie à effet tunnel (STM). La Fig. 2 présente les résultats de microscopie des très belles expériences de BLUNT *et al.* sur ce composé [BLUNT08] et leur traduction en termes de pavages de dimères. Nous reviendrons sur une description plus précise de ces expériences dans la Sec. IV.1.

Ces différentes pistes nous amènent donc à la même question: quelle est la physique des pavages de dimères ? Dans cette première partie, nous allons considérer le cas des modèles bidimensionnels, sur le réseau carré ou triangulaire pour simplifier. Nous ne considérerons pour l’instant que les pavages complets de dimères de cœur dur, *i.e.* tous les sites du réseau sont occupés par un et un seul dimère.

¹ avec un rapport un sur deux, dû au simple retournement de tous les spins dans une configuration

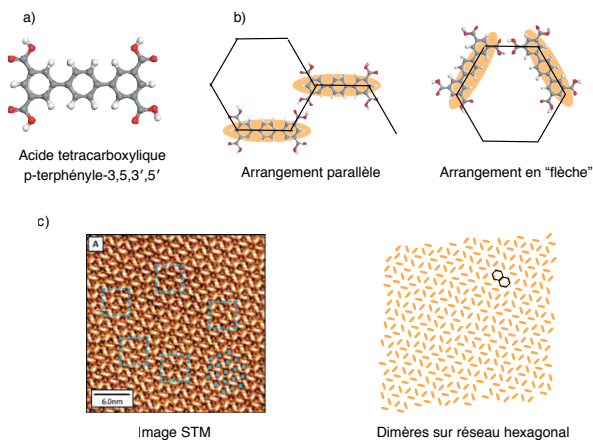


Fig. 2 Deux molécules d'acide tetracarboxylique p-terphényle-3,5,3',5' (a) s'adsorbent sur une surface de graphite de deux façons différentes (b), suivant un arrangement aux plus proches voisins parallèle ou en « flèche ». Ces arrangements peuvent être reproduits par des configurations locales de dimères sur le réseau hexagonal du graphite. (c) Les images STM de la surface peuvent être entièrement traduites en termes d'un pavage de dimères du réseau hexagonal. L'image STM et la représentation de la molécule sont tirées de la Réf. [BLUNT08].

I.2. Résultats connus sur les pavages de dimères en deux dimensions

Entropie des pavages

Que savons-nous sur les pavages de dimères en deux dimensions ? Tout d'abord, il faut savoir les compter. Pour des réseaux plans, le problème peut se résoudre exactement [KASTELEYN61, TEMPERLEY61, FISHER61], et ce nombre s'exprime comme le Pfaffien de la matrice de Kasteleyn. Les résultats obtenus par les Pfaffiens sont identiquement retrouvés avec des variables de Grassmann [HAYN94] : on trouvera une introduction à ces techniques typiques des problèmes de fermions libres dans la revue récente [ALLEGRA15] et dans le Chapitre 6 de la Réf. [KRAUTH06]. Le résultat principal est que le nombre de pavages $\#_{2d}$ varie exponentiellement avec le nombre de sites du réseau et le système possède donc une entropie extensive. Dans la limite asymptotique des grands réseaux, on trouve $\#_{2d} = \exp(s_{2d}N)$ (où N est le nombre de sites du réseau) et s_{2d} l'entropie par site, qui vaut $s_{2d} = G/\pi = 0.2915609\dots$ pour le réseau carré (G est la constante de Catalan) [KASTELEYN61, TEMPERLEY61, FISHER61], ou encore $s_{2d} = 0.4286\dots$ pour le réseau triangulaire [FENDLEY02]. À noter que ces résultats ont aussi été re-dérivés par Y. IKHLEF et J. JACOBSEN à l'aide de l'ansatz de Bethe [ALET06b].

Corrélations dimère-dimère et bipartité du réseau

Le nombre de pavages étant extensif avec la taille du réseau, nous pouvons faire de la physique statistique. On peut se demander par exemple si le système est désordonné, ordonné ou critique. Pour cela, on peut calculer la fonction de corrélation dimère-dimère $\langle d^\alpha(\mathbf{0})d^\beta(\mathbf{r}) \rangle^c$. Ici, $d(\mathbf{r})$ est le nombre d'occupation d'un dimère au site \mathbf{r} , et les indices $\alpha, \beta = x, y$ indiquent la direction dans laquelle pointe le dimère. Nous utiliserons parfois les raccourcis graphiques $d^{\ominus}(\mathbf{r})$ et $d^{\circ}(\mathbf{r})$ pour $d^x(\mathbf{r})$ et $d^y(\mathbf{r})$ respectivement. L'indice c indique que la corrélation est connexe : $\langle d^\alpha(\mathbf{0})d^\beta(\mathbf{r}) \rangle^c = \langle d^\alpha(\mathbf{0})d^\beta(\mathbf{r}) \rangle - \rho^2$, avec ρ la densité moyenne de dimère, égale à $1/z$ pour des réseaux réguliers de coordinence z . Il est important de réaliser à ce stade que nous sommes face à un problème *entropique* : bien que toutes les configurations soient équiprobables, les corrélations entre dimères ne sont pas forcément uniformes.

En se basant sur une méthode de Pfaffiens modifiée, les résultats exacts montrent une dif-

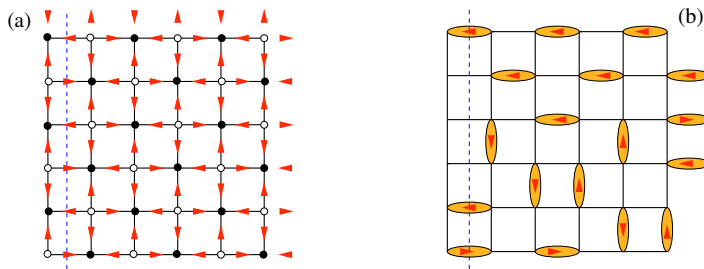


Fig. 3 Nombre de winding d'une configuration de dimères sur le réseau carré. (a) Convention d'orientation des liens du réseau : les flèches vont d'un sous-réseau (ici dénoté par des cercles blancs) à l'autre (cercles noirs). (b) Une configuration de dimères sur le réseau carré (avec la convention d'orientation rappelée pour chaque dimère). Le nombre algébrique de dimères qui croisent la ligne verticale pointillée est conservé, quel que soit l'emplacement de la ligne : c'est le nombre de winding de la configuration.

férence profonde entre réseaux bipartites et non bipartites, en tout cas en ce qui concerne les réseaux « simples » usuels. Ainsi, sur le réseau carré ou le réseau hexagonal (bipartites tous les deux), la décroissance de la fonction de corrélation à grande distance est algébrique (par exemple $\langle d^x(\mathbf{0})d^x(\mathbf{r} = (r, 0)) \rangle^c \propto (-)^r / \pi^2 r^2$ pour le réseau carré [FISHER63]) : le système est *critique*. Pour le réseau triangulaire ou kagome (réseaux non bipartites), la décroissance est exponentielle ($\langle d^\alpha(\mathbf{0})d^\beta(\mathbf{r}) \rangle^c \propto \exp(-r/\xi)$ (avec $\xi = 0.6014\dots$ pour le réseau triangulaire) : le système est dans une phase *liquide*.

En fait, tout n'est pas aussi simple : il existe des réseaux bipartites plus complexes où les corrélations sont exponentiellement décroissantes. C'est le cas par exemple du réseau « carré-octogone » [SALINAS74, KENYON09]. Toutefois, et à la connaissance de l'auteur, ce sont toujours des réseaux où il y a plusieurs pavages possibles dans la cellule élémentaire : on comprend intuitivement que les réarrangements locaux associés puissent décorrélérer facilement les configurations à grande distance et stabiliser une phase liquide.

Comment déterminer si les pavages d'un réseau donné constituent une phase liquide, critique voire ordonnée ? La réponse n'est pas simple et ne transparait pas dans le calcul des Pfaffiens, car reliée au résultat d'une intégrale complexe de la fonction de Green correspondante² [KENYON09]. Pour donner une réponse approximative mais simple, nous allons donner ici deux arguments qui, bien qu'inexactes, vont nous permettre d'entrevoir la différence entre réseaux bipartites et non bipartites.

Le premier argument concerne les symétries d'une configuration de dimères, et en particulier le nombre de quantités conservées. Les réseaux bipartites possèdent en effet une quantité conservée de plus grande symétrie que celle pour les réseaux non bipartites : cette quantité est le nombre d'enroulement (nombre de *winding*). Prenons pour le définir l'exemple d'une configuration quelconque de dimères sur le réseau carré, et sur chaque lien du réseau, dessinons une flèche qui va d'un sous-réseau donné à l'autre (Fig. 3a) : cela permet de définir une orientation pour chaque lien (un « courant »). Traçons maintenant une ligne fictive (par exemple verticale) qui croise les plaquettes du réseau. Le nombre d'enroulement est alors défini comme le nombre algébrique des dimères orientés qui croisent cette ligne (c.-à-d. en comptant +1 si le lien sur lequel se situe le dimère est orienté de gauche à droite dans notre exemple, -1 sinon). En considérant l'exemple de la Fig. 3b, il

² Une autre façon d'exprimer le problème est de regarder s'il existe un gap dans les bandes du système de fermions libres équivalent.

est facile de s'apercevoir que ce nombre est le même indépendamment de l'endroit où se situe la ligne verticale. Ceci se révèle vrai pour toute configuration, et permet de définir le nombre de winding W_y de la configuration, qui varie entre $-L_y/2$ et $L_y/2$ (L_y est la taille de l'échantillon dans la direction parallèle à la ligne). Bien sûr, il existe par symétrie une seconde quantité indépendante W_x dans l'autre direction. Pour un réseau non bipartite, il n'est plus possible d'assigner une orientation à chaque lien de la même façon puisqu'il n'y a plus deux sous-réseaux, et donc de définir un nombre de winding conservé identique d'une ligne à l'autre. Il subsiste toutefois une quantité conservée pour les réseaux non bipartites : il s'agit de la *parité* du nombre de dimères qui croisent la ligne de référence. Le nombre de dimères reste en effet pair ou impair dans tout l'échantillon quel que soit l'endroit où est placée la ligne, comme visible sur l'exemple du réseau triangulaire de la Fig. 4. À type de quantités conservées qualitativement différent, on s'attend à une physique elle aussi qualitativement différente pour les réseaux bipartites ou non. De plus, la contrainte du nombre algébrique de winding conservé étant bien plus forte que celle de la parité de ce nombre, on s'attend à un système plus corrélé sur le réseau carré que sur le réseau triangulaire : on comprend alors intuitivement que le réseau carré puisse être dans une phase critique alors que le réseau triangulaire est dans une phase liquide.

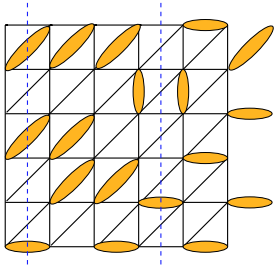


Fig. 4 Le nombre de dimères qui croise une ligne fixe sur le réseau triangulaire n'est pas conservé, mais sa parité l'est, comme illustré par les deux lignes verticales.

Le second argument est en fait relié indirectement au premier, mais va nous servir indépendamment pour construire par la suite la théorie des champs appropriée. Il est basé sur la notion de *hauteur* [BLOTE82, NIENHUIS84] pour les réseaux bipartites. La notion de hauteur intervient dans la description de nombreux systèmes physiques en deux dimensions, et provient notamment de la physique des surfaces. Dans notre cas, nous allons encoder de façon consistante une configuration de dimères dans une quantité scalaire (la hauteur), définie sur le réseau dual. La hauteur vit donc sur les plaquettes du réseau réel, et est définie à une constante près. Prenons par exemple une configuration de dimères sur le réseau carré (Fig. 5), choisissons une plaquette au hasard et assignons lui arbitrairement une hauteur égale à 0 (« niveau de la mer »). Nous allons définir de proche en proche la hauteur de toutes les plaquettes voisines avec la règle suivante : si en passant d'une plaquette à une autre, on croise un dimère, alors la hauteur varie de $\pm 3/4$. Sinon, elle varie de $\mp 1/4$. Le signe \pm ou \mp dans les expressions précédentes est déterminé de la façon suivante : si pour passer d'une plaquette à une autre, nous tournons *dans le sens antitrigonométrique* autour d'un site du sous-réseau A, alors on choisit les signes $+3/4$ et $-1/4$. Si l'on tourne autour du sous-

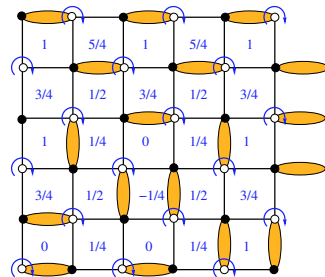


Fig. 5 Représentation en termes de hauteur d'une configuration de dimères sur le réseau carré. La convention d'orientation est représentée sur un des deux sous-réseaux : en tournant autour d'un sous-réseau dans le sens de la flèche, la hauteur doit diminuer de $1/4$ si le lien traversé ne possède pas de dimère, et augmenter de $3/4$ sinon.

réseau B, les variations de hauteur sont $-3/4$ et $+1/4$. Il est très facile de comprendre la valeur des constantes et leurs signes relatifs en remarquant qu'en faisant une boucle autour d'un site, on doit nécessairement croiser un dimère et trois liens vides. Pour que la hauteur soit bien une quantité monovaluée, il faut que la variation totale de hauteur soit nulle durant cet événement - ce qui mène donc aux constantes précédentes. On se convaincra aussi à l'aide de la figure que la convention de signe pour la circulation autour d'un sous-réseau donné est essentielle dans cet argument pour pouvoir définir de façon consistante la hauteur. Il est en effet impossible de définir une hauteur de façon consistante pour les réseaux non bipartites, encore une fois à cause de l'absence de deux sous-réseaux. Nous devinons donc de nouveau avec cet argument une physique différente pour les deux types de systèmes (bipartites ou non). La hauteur sera une notion essentielle dans le [Chapitre III](#).

Monomères

Nous poursuivons notre présentation en introduisant (à faible dose) des *monomères*, un nouvel objet dans ce type de modèles. On appelle monomère tout site vide du réseau inoccupé par un dimère, c.-à-d. les monomères sont les défauts dans les pavages de dimères. Pour les pavages compacts de dimères évoqués jusqu'ici, il n'y a pas de monomères. Il s'agit en fait du cas particulier du problème plus général *dimères-monomères*, qui consiste à permettre à une densité finie de monomères (ou bien à un nombre moyen fixé par une certaine fugacité) d'exister dans un pavage de dimères. Contrairement au cas sans monomères, il n'existe pas de méthode exacte générale pour énumérer simplement ces pavages dimères-monomères en deux dimensions (bien qu'il existe une heuristique très performante [BAXTER68]). Le problème dimères-monomères est en fait un problème important en physique mathématique [FRIEDLAND05]. D'un point de vue physique, il est établi que l'introduction d'une densité finie (même infinitésimale) de monomères dans un système de dimères sur un réseau bipartite va déstabiliser ce système critique pour le rendre liquide. Cela a été observé numériquement à l'aide de développement en séries [GAUNT69] ou de simulations Monte Carlo [KRAUTH03], et sera compris aisément avec les théories des champs développées dans le [Chapitre III](#). Plus intuitivement, l'introduction de monomères brise la règle de hauteur définie auparavant pour le réseau carré (les monomères sont des dislocations dans le champ de hauteur), et le nombre de winding n'est plus une quantité conservée : on devine alors que le système ne peut plus être critique. En fait, ceci pouvait se déduire d'un résultat très général de HEILMANN et LIEB [HEILMANN70] obtenu sur l'énergie libre d'un tel système, qui indique que s'il y a une transition de phase, elle doit avoir lieu à densité nulle de monomères. Or il y a forcément une transition de phase, puisque dans le cas limite d'une densité unité de monomères, il ne peut pas y avoir évidemment de corrélations critiques de dimères. Pour un réseau non bipartite, il n'y a pas de transition de phase, puisque le système est déjà dans un état liquide. Nous n'allons pas pour l'instant considérer ce problème, mais celui plus simple où l'on introduit un nombre fini (en général deux) de monomères dans un pavage complet de dimères, et non pas une densité finie. La question est alors de savoir combien il y a de façons de poser ces deux monomères *tests* en fonction de la distance les séparant. Plus précisément, on définit la fonction de corrélation monomère-monomère

$$M(\mathbf{r}) \equiv \langle m(\mathbf{0})m(\mathbf{r}) \rangle \propto Z(\mathbf{r})$$

comme proportionnelle à la fonction de partition avec deux monomères séparés de \mathbf{r} , *i.e.*

$Z(\mathbf{r})$ est le nombre de pavages dimères-monomères admettant les deux monomères. La constante de proportionnalité est généralement choisie telle que $M(1) = 1$, ce qui pour des réseaux réguliers correspond à une constante égale à $1/zZ$ où z est la coordinnence du réseau et Z le nombre de pavages possibles sans monomères. Ici $m(\mathbf{r})$ est l'opérateur nombre de monomères au site \mathbf{r} . Il est important de comprendre que cette fonction de corrélation monomère-monomère n'est pas un simple facteur géométrique, puisque les deux monomères interagissent en fait à travers la mer de dimères dans laquelle ils sont posés. $M(\mathbf{r})$ va donc refléter la physique du système à travers sa réponse à l'introduction de ces monomères tests.

La manière de calculer cette fonction de corrélation exactement a aussi été obtenue dans les années 60 [FISHER63], et implique une perturbation des Pfaffiens étudiés dans le cas sans monomères. Le calcul est un peu laborieux, mais peut être effectué à l'aide des déterminants de Toeplitz (voir Réf. [ALLEGRA15] pour une synthèse récente). On retrouve avec cet indicateur une différence entre les réseaux bipartites et non bipartites. Pour les réseaux bipartites, remarquons tout d'abord que les deux monomères tests doivent se situer sur des sous-réseaux différents (sinon $M(\mathbf{r}) = 0$), alors qu'il n'y a aucune restriction pour les réseaux non bipartites. Ensuite, les calculs exacts [FISHER63] montrent que pour les réseaux bipartites, la fonction de corrélation s'annule algébriquement aux grandes distances, par exemple $M(\mathbf{r} = (r, 0)) \propto 1/\sqrt{r}$ pour le réseau carré. Dans ce cas, on parle de monomères tests *confinés* (algébriquement), car la probabilité de trouver deux monomères à grande distance s'annule. Par contre, pour le réseau triangulaire, on obtient que la fonction de corrélation décroît exponentiellement vers une constante $M(\mathbf{r}) \propto \exp(-r/\xi) + M(\infty)$, où $M(\infty) = 0.89658\dots$ et la longueur de corrélation $\xi = 0.6014\dots$ se trouve être la même que pour les corrélations dimère-dimère. On parle alors de monomères tests *déconfinés*, car il existe une probabilité non nulle de les trouver arbitrairement éloignés.

1.3. Un modèle de dimères en interactions

La physique statistique s'intéresse en général aux propriétés collectives de particules ou objets lorsqu'ils entrent en interaction. Pourtant jusqu'ici, nous avons simplement évoqué le problème de dimères libres, sans interaction. Certes, la contrainte globale sur les pavages de dimères ainsi que la propriété de cœur dur de ces objets correspondent à une interaction cachée entre ces objets (modèle *entropique* [KRAUTH06]). Toutefois, il apparaît étrange que jusqu'ici, personne n'ait étudié le problème de dimères en interaction (en fait, ce n'est pas tout à fait le cas, et nous reviendrons sur l'historique de ces modèles).

Définition

Le reste de cette partie est consacré à l'étude d'un modèle de dimères de cœur dur en interaction sur le réseau carré introduit dans la Réf. [ALET05]. La fonction de partition pour une température T s'écrit :

Éq. (2)

$$Z = \sum_c \exp(-E_c/T)$$

$$E_c = v \left[N^c \left(\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \right) + N^c \left(\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \right) \right]$$

où la somme porte sur tous les pavages de dimères c du réseau carré, auxquels on assigne une énergie d'interaction E_c qui compte le nombre $N^c \left(\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \right) + N^c \left(\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \right)$ de plaquettes avec

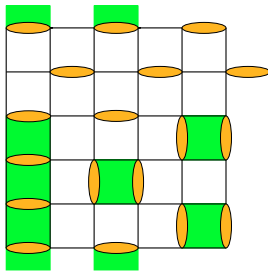


Fig. 6 Illustration du modèle de dimères en interaction sur le réseau carré. Chaque plaquette (colorée) du réseau qui possède deux dimères parallèles contribue $+v$ à l'énergie.

des dimères parallèles (horizontaux ou verticaux) dans la configuration c . Ce modèle est illustré dans la Fig. 6, où pour une configuration de dimères, les plaquettes colorées contribuent $+v$ à l'énergie totale de cette configuration. Le signe de v détermine la nature des interactions entre dimères : $v < 0$ favorise l'alignement colonnaire des dimères alors que $v > 0$ favorise les configurations alternées (voir plus loin). $|v|$ sera choisi égal à 1 (échelle d'énergie). Pour la suite, nous nous concentrerons sur le cas colonnaire $v < 0$, sauf mention explicite.

Pourquoi ce terme d'interaction entre dimères ?

À vrai dire, c'est probablement le terme le plus simple que l'on puisse imaginer si l'on veut créer une interaction locale (plus proche voisins) entre dimères. De plus, ce terme est déjà connu comme la partie classique du modèle de dimères quantiques Éq. (1). À ce titre, ce modèle classique nous renseignera sur la physique du modèle quantique température nulle lorsque le terme potentiel domine, mais aussi pour la physique à haute température (où les effets quantiques sont estompés). Finalement, ce type de modèles peut parfois émerger perturbativement comme modèle effectif de magnétisme frustré. Nous avons évoqué en effet que certains modèles (notamment quantiques) de spins frustrés avaient des fondamentaux en correspondance avec l'ensemble des pavages de dimères d'un réseau. En modifiant les modèles originaux (par exemple en prenant le modèle d'Heisenberg avec une anisotropie sur site grande ou en présence d'un fort champ magnétique), plusieurs termes apparaissent en perturbation qui vont coupler les dimères entre eux [SEN08, SEN09]. Ces termes sont parfois hors diagonaux (quantiques), mais parfois aussi diagonaux (classiques). Dans ce dernier cas, les modèles effectifs obtenus se révèlent très proches de celui étudié ici.

Que savons nous dire sur ce modèle ? Prenons en compte les considérations simples et habituelles de la physique statistique. Il existe deux points exacts : à température infinie, et à température nulle. À température infinie, les interactions n'interviennent pas et il s'agit du problème entropique évoqué précédemment. Nous savons que le système y est critique, avec des corrélations dimère-dimère et monomère-monomère décroissant algébriquement : $\langle d(\mathbf{0})d(\mathbf{r}) \rangle^c \propto r^{-2}$ et $M(\mathbf{r}) \propto r^{-1/2}$. Il est par ailleurs facile de vérifier que seules les 4 configurations colonnaires représentées Fig. 7 minimisent l'énergie. À $T = 0$, le système s'ordonne donc dans une phase colonnaire, qui brise spontanément l'invariance par translation et par rotation de $\pi/2$.

Entre la phase critique à $T = \infty$ et la phase ordonnée à température nulle, il existe certaine-

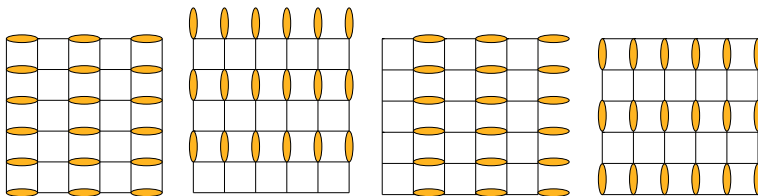


Fig. 7 Les quatre fondamentaux colonnaires du modèle de dimères en interaction sur le réseau carré (pour $v < 0$).

ment donc (au moins) une transition de phase, voire même possiblement une phase intermédiaire. Pour T faible mais fini, on s'attend à ce que la phase colonnaire subsiste toujours, car il faut une énergie finie de l'ordre de $|v|$ pour passer d'un des 4 fondamentaux à un état excité (le spectre de ce modèle étant discret). Par contre, nous ne pouvons pas dire avec ce type d'argument si la phase critique subsiste à température grande, mais finie. Il faudra recourir à d'autres méthodes plus complexes pour pouvoir être plus précis.

Finissons cette section avec des remarques historiques concernant ce modèle : après l'avoir défini et étudié dans la Réf. [ALET05], nous nous sommes aperçus qu'il avait été déjà introduit (mais pas forcément bien étudié) dans d'autres contextes auparavant. Ce modèle a été défini [HEILMANN77] puis étudié par développement haute température [POLAND79] dans l'étude de la physique des cristaux liquides. Il n'a pas été développé plus avant, car il ne montrait pas de phase liquide à basse température, ce qui était alors recherché à l'époque dans ce contexte. Plus tard, BRANKOV *et al.* ont aussi étudié ce modèle à l'aide de simulations Monte Carlo [BRANKOV90, BRANKOV92]. Nous reviendrons plus tard sur ces études précédentes qui ont toutes raté la nature des phases dans ce modèle, ainsi que la criticalité associée.

Comment étudier ce modèle ?

Lorsque l'on branche les interactions entre dimères, le modèle n'est plus soluble par les techniques de Pfaffiens. En effet, celles-ci sont typiquement limitées aux problèmes de fermions libres, auquel le modèle des dimères sans interaction est équivalent. Un espoir de résolution analytique reste possible avec l'ansatz de Bethe, qui a été dérivé pour le problème des dimères sans interaction et qui, potentiellement, peut aller au delà des fermions libres. Malheureusement, il n'a pas été possible d'écrire de façon auto-consistante les équations de Bethe dans le cas avec interaction [ALET06B].

Il reste donc les méthodes numériques pour simuler ce modèle. Pour les problèmes de physique statistique classique en deux dimensions, deux méthodes de choix existent : les techniques de Monte Carlo et la famille des méthodes matrice de transfert, que nous présentons brièvement ci-dessous. Les méthodes Monte Carlo vont permettre de calculer les valeurs moyennes d'observables thermodynamiques, alors que dans le second cas, les calculs se concentreront plutôt sur les valeurs propres de la matrice de transfert, reliées à la fonction de partition et à l'énergie libre.

- **Simulations Monte Carlo de modèles de dimères**

Tout d'abord et bien qu'il soit soluble analytiquement, voyons comment il est possible de simuler par Monte Carlo le problème des dimères sans interaction. Nous nous plaçons dans la gamme des techniques Monte Carlo en chaînes de Markov, où l'on passe d'une configuration à une autre avec une certaine dynamique Monte Carlo. Pour s'assurer d'échantillonner correctement la distribution de probabilité d'équilibre, il suffit de vérifier le bilan détaillé pour chaque mouvement Monte Carlo, et que l'ensemble des mouvements soit ergodique.

Algorithme Monte Carlo local — Sans interaction, le bilan détaillé est trivialement vérifié en acceptant tous les mouvements Monte Carlo, à condition bien sûr qu'ils emmènent vers une nouvelle configuration valide de l'espace des phases. Au contraire de ce qui se passe par exemple pour un modèle d'Ising où le mouvement de base consiste à retourner un spin, cette condition est non triviale pour les modèles contraints comme le modèle de dimères. En effet, tourner simplement de $\pi/2$ n'importe quel dimère de la configuration initiale (représentée dans la Fig. 8a) aboutit à une configuration non permise, puisque deux

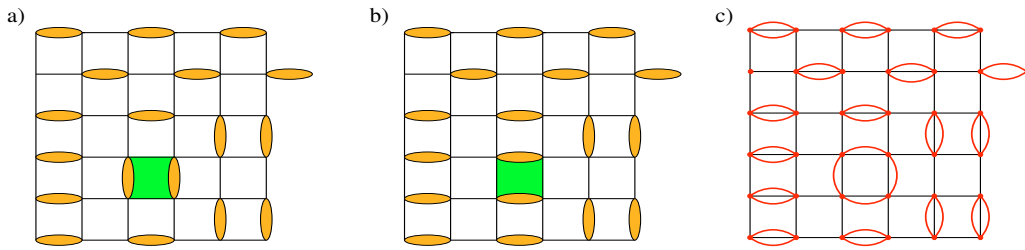


Fig. 8 Illustration de l'algorithme Monte Carlo local : a) Configuration initiale de dimères. b) Configuration obtenue après renversement d'une plaquette (colorée pour illustration) possédant deux dimères parallèles. c) Graphe de transition d'un tel mouvement.

dimères se partagent un site. On s'aperçoit assez rapidement que le mouvement le plus simple pour aboutir à une nouvelle configuration valide consiste à tourner deux dimères parallèles situés autour d'une même plaquette (on « flippe » la plaquette). La Fig. 8b illustre ce mouvement local.

Le lecteur habitué aux simulations Monte Carlo en physique statistique s'attendra à ce qu'un algorithme local, bien que valide, soit lent et non efficace. Proche d'une transition de phase (comme celle attendue dans le modèle Éq. (2)), il risque par ailleurs de souffrir de ralentissement critique, empêchant l'étude d'échantillons de grande taille. De plus, on peut montrer que cet algorithme n'est pas ergodique, car il ne permet d'accéder qu'à des configurations ayant *même nombre de winding* : on est donc bloqué dans le secteur de winding de la configuration initiale et l'algorithme ne visite donc pas tout l'espace des phases.

Graphe de transition et algorithme de ver — Inspiré par les algorithmes d'amas (*cluster*) pour les modèles de spin, nous avons envie d'effectuer des mouvements non locaux dans l'espace des phases. Pour comprendre et construire de tels mouvements, superposons deux configurations aléatoires de dimères (Fig. 9a). On s'aperçoit que l'ensemble des dimères des deux configurations forment des boucles (Fig. 9b). Ces boucles sont nécessairement fermées, puisque chaque site est occupé par un dimère dans les deux configurations (elles peuvent éventuellement être de taille 2 si deux dimères se situent sur le même lien dans les deux configurations). Ces boucles sont appelées boucles de transition, et l'ensemble qu'elles forment le graphe de transition : en effet, étant donné une configuration de dimères et le graphe de transition, nous pouvons reconstruire la seconde configuration. On comprend donc que chaque mouvement Monte Carlo correspond en fait au choix d'un graphe de transition. Bien sûr, on ne peut pas appliquer n'importe quel graphe de transition sur n'importe quelle configuration de dimères : il faut que les boucles de ce graphe soit constituées

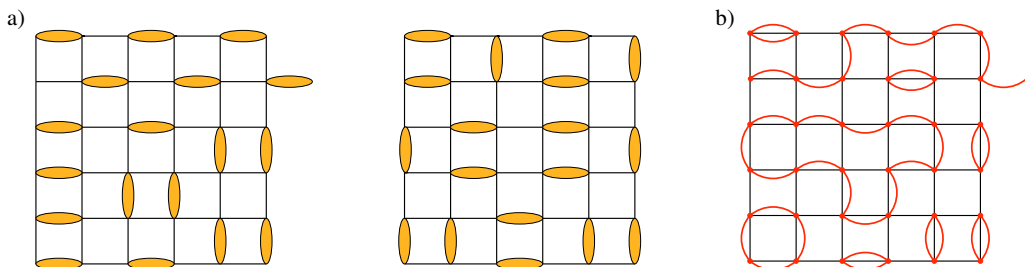


Fig. 9 (a) Deux configuration de dimères et (b) leur graphe de transition.

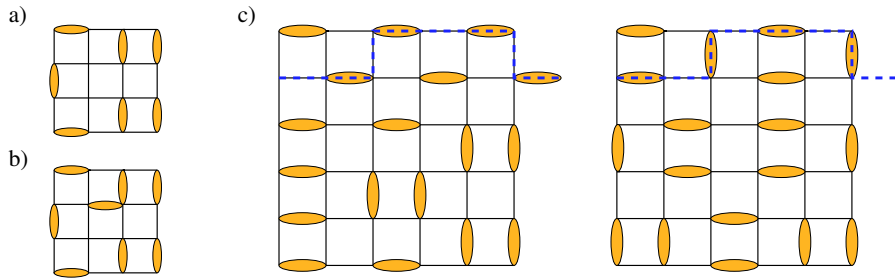


Fig. 10 Illustration de l'algorithme Monte Carlo de ver : a) pas intermédiaire où un site est dépourvu de dimères, b) pas intermédiaire où un site est couvert par deux dimères. c) Une configuration initiale de dimères traversée par un ver (symbolisé par la ligne pointillée) donne lieu à une nouvelle configuration de dimères fortement différente de la configuration initiale. Dans cet exemple, le ver passe par les conditions aux bords périodiques de l'échantillon et le nombre de winding des deux configurations est par conséquent différent.

alternativement (un « pas » sur deux) par la configuration de dimères en question (graphe compatible). Le mouvement Monte Carlo local décrit auparavant correspond à un graphe de transition particulièrement simple : il est constitué de boucles triviales de taille 2 pour la majorité des dimères, sauf pour ceux parallèles autour de la plaquette en question où l'on forme une boucle de taille 4 (Fig. 8c).

Pour obtenir un algorithme Monte-Carlo non local, il suffit alors « d'agrandir » la taille de cette boucle. Pour cela, effectuons une marche au hasard. Partant d'un site de la configuration initiale, considérons le dimère qui y réside, déplaçons-nous au site relié par ce dimère puis effaçons ce dimère. Nous nous retrouvons sur un site du réseau dépourvu de dimères (Fig. 10a) : pour y remédier, plaçons un nouveau dimère au hasard sur un des quatre liens (pour l'exemple considérons un lien différent de celui où nous avons effacé le dimère) et déplaçons-nous jusqu'au nouveau site pointé par le dimère. Nous n'avons toujours pas une configuration valide mais cette fois-ci il s'agit du problème inverse, avec un site occupé par deux dimères (Fig. 10b). Effaçons le dimère qui s'y trouvait, et déplaçons-nous sur le site vers lequel ce dimère pointait. On se retrouve dans la situation de la Fig. 10a, et nous pouvons continuer ainsi le même cheminement. Ce mouvement s'arrête lorsque nous replaçons un dimère sur le site initial (maintenant dépourvu de dimère) : on aboutit à une nouvelle configuration valide (Fig. 10c), totalement différente de la configuration initiale. Ce mouvement non local permet donc de créer un graphe de transition arbitrairement grand.

Cette méthode est appelée *algorithme de ver*³, car il peut être vu comme un ver faisant une marche aléatoire dans une configuration de dimères (en fait, la marche n'est pas entièrement au hasard puisqu'un pas sur deux est dicté par la configuration initiale de dimères). On voit facilement que si le ver ainsi décrit passe par les conditions aux bords périodiques pour fermer la boucle de transition, le nombre de winding de la nouvelle configuration sera différent de celui de la configuration initiale. Ceci prouve que l'algorithme de ver est ergodique.

Une revue pratique des méthodes de ver pourra être trouvée dans la Réf. [ALET07]. L'algorithme de ver permet de simuler des systèmes de bien plus grandes tailles que ceux accessibles avec l'algorithme local : typiquement jusqu'à environ 500^2 pour un réseau carré et 150^3 pour un réseau cubique (au lieu de 64^2 ou 32^3 au maximum avec un algorithme local). Il se révèle aussi très efficace proche d'un point de transition, avec un ralentissement cri-

³ en référence à l'algorithme de ver originellement proposé pour des modèles de spins dans la Réf. [PROKOP'EV01]

tique quasiment nul. Enfin, bien que nous ne générons que des configurations de dimères valides (c.-à-d. avec un et un seul dimère par site), cet algorithme permet de *sonder la physique des monomères tests*. En effet, si l'on prend une « photographie » durant la construction de l'algorithme (Fig. 11), on voit très clairement que nous traitons de configurations de dimères dans lesquelles ont été insérés deux monomères sur des sous-réseaux différents. En fait, la construction de l'algorithme nous assure que l'histogramme de la distance entre la « tête » et la « queue » du ver (les deux monomères) est *exactement* proportionnel à la fonction de

corrélation monomère-monomère $M(\mathbf{r})$. Cette propriété, qui peut paraître surprenante, est en fait typique des algorithmes de vers [PROKOF'EV01, PROKOF'EV98]. Cela permet aussi d'affirmer que l'algorithme de ver est *physique*, puisque ses propriétés typiques (telles que la taille moyenne des boucles de transition) suivent fidèlement la physique des défauts du modèle. Cette remarque nous permet d'ailleurs de deviner dans quelles situations l'algorithme sera efficace : lorsque les monomères sont déconfinés, les boucles sont grandes et le mouvement non local décorrèle fortement les configurations. Par contre, on s'attend à un algorithme moins performant dans une phase où les monomères sont confinés. Le corollaire amusant est que les performances brutes de l'algorithme pour un jeu de paramètres donné permettent de deviner dans quelle phase physique le système se trouve.

Algorithme « Pocket » — Un algorithme alternatif a été proposé par KRAUTH et MOESNER [KRAUTH03] pour traiter les dimères non localement, l'algorithme *pocket*. Il s'agit ici de définir un axe de symétrie dans le système, et de partir avec une « poche », qui est une liste de dimères. L'étape principale consiste à retirer de la poche (initialement remplie d'un seul dimère) un élément aléatoire, qui est ensuite reflété par rapport à l'axe de symétrie. Si le dimère reflété touche un ou plusieurs autres dimères, ceux-ci sont ajoutés à la poche. L'étape principale est ensuite répétée jusqu'à ce qu'il n'y ait plus de dimères dans la poche. Il est possible de montrer que l'algorithme ainsi édicté est ergodique si l'on considère un ensemble approprié d'axes de symétrie [KRAUTH03]. On retrouvera des explications plus détaillées de cet algorithme dans la référence originelle [KRAUTH03], ainsi qu'une introduction pédagogique dans la Réf. [KRAUTH06].

Cet algorithme assez original est issu d'une famille d'algorithmes spécifiques aux modèles de particules sur réseau (algorithmes de pivot [DRESS95]). Ses performances sont typiquement comparables avec celles de l'algorithme de ver, en termes de tailles accessibles.

Ajout d'interactions et de monomères — Jusqu'ici, nous avons décrit les simulations Monte Carlo pour des dimères sans interactions. Comment les traiter ? Il suffit de rajouter une probabilité d'acceptation de la nouvelle configuration qui dépend de l'énergie, afin de vérifier le bilan détaillé. Notons que pour les trois algorithmes, cette modification n'est pas trop complexe et surtout ne provoque (presque) pas de perte d'efficacité pour les algorithmes non locaux.

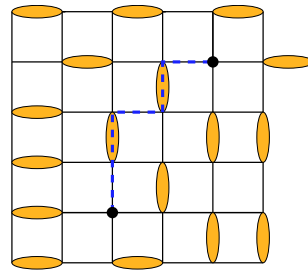


Fig 11 Configuration intermédiaire de l'algorithme de ver. Deux sites sont laissés sans dimère : cette configuration va contribuer au calcul de la fonction de corrélation monomère-monomère $M(\mathbf{r})$, où \mathbf{r} est le vecteur séparant les deux sites vides.

Pour l'algorithme Monte Carlo local, il s'agit tout simplement d'une condition de Metropolis [METROPOLIS53], avec $P_{\text{accept}} = \min(1, \exp(-\beta\Delta E))$ où ΔE est la différence d'énergie entre la configuration finale et la configuration initiale. À noter que bien que les deux dimères restent parallèles autour de la même plaquette (qui ne contribue donc pas à ΔE) dans ce mouvement Monte Carlo, les plaquettes environnant la plaquette flippée (et donc l'énergie) vont bien sûr être modifiées.

Pour l'algorithme de ver, l'insertion des aspects énergétiques se fait au moment de la situation de la Fig. 10a, lorsqu'il faut placer le dimère sur un des quatre liens. Au lieu de choisir un lien au hasard, le choix va maintenant se faire selon l'énergie locale associée à chaque possibilité. Le choix le plus simple est le bain de chaleur (*heat-bath*), où l'on place le dimère sur le lien σ_f avec une probabilité P_{σ_f} proportionnelle à $\exp(-\beta E_{\sigma_f})$, où E_{σ_f} compte un facteur $+v$ pour toutes les plaquettes environnantes qui auront deux dimères parallèles si l'on met le dimère dans la direction σ_f . On montre alors que ce choix permet de vérifier un bilan détaillé local, puis global le long du parcours du ver. Il existe d'autres choix possibles qui vérifient le bilan détaillé local, notamment celui des « vers dirigés ». L'idée ici est que le choix de placer le dimère doit certes dépendre de la direction σ_f où l'on souhaite le placer, mais aussi de la direction σ_i où le dimère était placé auparavant. L'écriture du bilan détaillé local emmène à un jeu d'équations à vérifier pour les probabilités conditionnelles $P_{\sigma_i \rightarrow \sigma_f}$, et il existe de nombreuses possibilités pour satisfaire ces équations. On applique alors une règle empirique qui consiste à minimiser la probabilité $P_{\sigma_i \rightarrow \sigma_i}$, c.-à-d. le cas où le ver revient sur ses pas (car on s'attend à ce que ce mouvement soit inutile). Cette stratégie d'un « ver dirigé » (*directed worm*) est inspirée des algorithmes de boucles dirigées en Monte Carlo quantique [SYLJUASEN02, ALET03], et a été proposée pour la première fois par SANDVIK et MOESSNER [SANDVIK06] dans le contexte des dimères. On trouvera plus de détails dans ces références précitées (notamment la Réf. [ALET07]) ainsi que dans la Réf. [ALET06B], où une subtilité liée au calcul de la fonction de corrélation monomère-monomère $M(\mathbf{r})$ en présence d'interactions est aussi évoquée.

Pour l'algorithme *pocket*, il est possible de rajouter les interactions en autorisant l'inclusion dans la poche non seulement des dimères qui touchent le dimère reflété, mais aussi ceux qui interagissent avec lui autour d'une plaquette (avant ou après la réflexion) [PAPANIKOLAOU07]. On peut alors créer plusieurs boucles non triviales dans le graphe de transition. Cette méthode découle des travaux de LUIJTEN et collaborateurs [LIU04, LIU05] pour traiter les interactions dans le cadre des algorithmes de pivot pour les systèmes de fluides.

Finissons cette section sur les algorithmes Monte Carlo avec une remarque sur l'insertion de monomères dans un modèle de dimères. L'algorithme de ver permet naturellement de sonder la physique de deux monomères test, mais qu'en est-il d'une densité finie ? Pour l'algorithme *pocket*, il suffit de partir dans la configuration initiale avec le nombre de monomères voulu [KRAUTH03]. Alternativement, on peut rajouter un pas intermédiaire Monte Carlo de dissociation de dimères / création de monomères contrôlée par un potentiel chimique pour les monomères. On peut montrer⁴ que l'on peut aussi adapter l'algorithme de ver, en permettant au ver de s'arrêter (avec une probabilité dépendant d'un potentiel chimique) en tout point du réseau, et non pas seulement en son point de départ. La boucle de transition est alors non fermée, et les deux monomères ainsi libérés se situent aux extrémités ouvertes de la boucle. À noter qu'il est possible d'adapter ces deux algorithmes avec monomères au cas où les dimères interagissent. Cela est aisé avec l'algorithme *pocket*, un peu plus complexe

4 F. Alet, non publié. Un algorithme similaire est utilisé dans la Réf. [SEN09]

avec l'algorithme de ver.

- **Matrice de transfert**

La technique de matrice de transfert considère des réseaux de taille $L \times M$ (où l'on prendra typiquement par la suite $M \rightarrow \infty$). La fonction de partition du modèle de dimères (tout d'abord considéré sans interaction) s'écrit pour ce réseau $Z(L, M) = \text{Tr}' T(L)^M$, où la matrice de Transfert T va relier une configuration α de dimères d'une ligne horizontale du réseau à une autre α' sur la ligne horizontale supérieure. Les configurations de ligne sont données par des nombres d'occupation de dimères sur chaque lien (horizontal et vertical). Une configuration de ligne est valide si bien sûr la contrainte de cœur dur est respectée par les nombres d'occupation. De même, il faut s'assurer que les configurations de ligne α et α' soient compatibles entre elles : seuls les couples de configurations compatibles auront un élément non nul $T_{\alpha\alpha'} = 1$ de la matrice de transfert. Ceci est dénoté par l'indice ' dans la trace de la fonction de partition.

Nous nous intéresserons par la suite essentiellement aux valeurs et vecteurs propres de la matrice de transfert. Les symétries du modèle de dimères peuvent alors être mises à profit dans la construction de la matrice de transfert, en particulier les symétries d'espace et topologiques. Ainsi, pour un système périodique dans la direction d'espace, T est diagonale par bloc dans chaque secteur de winding W_x , ainsi que dans chaque secteur d'impulsion k . Comme cela est usuel pour les méthodes de type diagonalisation exacte, l'utilisation des symétries a un double avantage. Premièrement, la taille des matrices à diagonaliser est considérablement réduite. Secondement, connaître les symétries permet d'obtenir de l'information sur la nature physique des états propres dans le bloc considéré. Ainsi, il est facile de voir que le secteur $W_x = 0$ est le plus grand, et sera le seul à contribuer à la fonction de partition. Par contre, les secteurs $W_x \neq 0$ correspondent à l'introduction de $|W_x|$ monomères dans un sous-réseau de la configuration de la ligne initiale du système, et de $|W_x|$ sur l'autre sous-réseau dans la configuration de la ligne finale. Cette propriété, associée à l'analyse par théorie conforme, sera grandement mise à profit par la suite. En utilisant toutes les symétries, il a été possible de simuler sans difficulté majeure des réseaux de taille $L = 18$, $M = \infty$, et des tailles plus grandes sont certainement accessibles maintenant avec un peu plus d'effort.

La valeur propre principale et le vecteur propre correspondant sont obtenus dans chaque secteur de symétrie en utilisant la méthode standard des puissances [WILKINSON88], où on applique un grand nombre de fois la matrice de transfert sur un vecteur initial situé dans le secteur désiré. Il est possible d'obtenir des valeurs propres plus hautes en prenant un jeu de vecteurs maintenus orthogonaux après chaque itération [WILKINSON88].

Les interactions entre dimères s'incluent quant à elles facilement en remplaçant la valeur 1 de l'élément de matrice $T_{\alpha\alpha'}$ par $\exp(-N_{\alpha\alpha'}\beta v)$. Ici $N_{\alpha\alpha'}$ est le nombre de plaquettes en interaction présentes dans le système des deux configurations de ligne α et α' mises face à face (en échelles). Enfin, il est possible d'étendre la définition de la construction de la matrice de transfert pour une densité finie de monomères (ou à l'aide d'un potentiel chimique pour les monomères), en relaxant la contrainte sur les nombres d'occupation dans les configurations de lignes. Par contre, dans ce cas, le nombre de winding n'est plus une quantité conservée, et tous les secteurs correspondant de la matrice de transfert sont mélangés, rendant la taille des matrices à simuler bien plus importante. Dans ce cas, il est possible d'étudier des systèmes jusqu'à typiquement $L = 16$, $M = \infty$.

Cette section n’était qu’une présentation rapide de la méthode de matrices de transfert. De nombreux détails techniques supplémentaires pourront être trouvés dans les Réfs. [ALET06B, CASTELNOVO07, TROUSSELET07].

- Réseau de tenseurs: algorithme *Time-Evolving Block Decimation* et de *Groupe de Renormalisation*

Plus récemment, une approche moralement proche à celle de la matrice de transfert a été utilisée pour étudier les modèles de dimères en dimension deux [LI14, ROYCHOWDHURY15, LI15]. Cette approche, dite de réseau de tenseurs, consiste à assigner à chaque site du réseau un tenseur $T_{ijkl\dots}$ (avec z indices, où z est la coordinence du réseau) où chaque indice « virtuel » i, j, k, l, \dots peut prendre les valeurs 0 ou 1 selon la présence ou non d’un dimère sur le lien correspondant. Pour décrire les pavages de dimères (pour l’instant sans interactions), la contrainte de coeur dur est assurée en donnant une valeur non nulle à l’élément $T_{ijkl\dots}$ seulement si $i + j + k + l + \dots = 1$. La fonction de partition du système (de taille finie ou infinie) s’écrit alors comme une trace sur tous les indices virtuels d’un produit de tenseur, avec des indices communs pour des sites voisins sur le réseau (afin de dénoter tous les liens partagés), par exemple : $Z = \sum_{ijklmnopqrs\dots} T_{ijkl} T_{imnp} T_{jgrs} \dots$. Il est possible en adaptant les formes des tenseurs et les valeurs de leurs éléments de tenir compte de la présence de monomères ou d’interactions entre dimères [LI14]. Jusqu’ici cette description est entièrement équivalente à la méthode de transfert décrite dans la Sec. I.3.2.2.

La différence provient de comment la somme (la contraction des tenseurs) est effectuée. Alors que la matrice de transfert effectue cette somme exactement sur des réseaux de taille finie (dans la direction transverse), les méthodes proposées récemment effectuent une contraction approximative, en utilisant des concepts venus de l’information quantique et les algorithmes correspondant très efficaces pour simuler les systèmes quantiques 1d (pour une revue, voir la Réf. [SCHOLLWOCK11]). Les références [LI14, LI15] utilisent un algorithme de type iTEBD [VIDAL07] (qui sélectionne à chaque produit de tenseur les valeurs singulières dominantes dans une décomposition SVD), alors que la référence [ROYCHOWDHURY15] utilise un groupe de renormalisation dans l’espace réel (utilisant lui aussi une SVD). Connaissant l’efficacité de ces méthodes pour les systèmes quantiques 1d, on s’attend à une même efficacité pour les systèmes classiques 2d non critiques. C’est en effet le cas, et les références [LI14, LI15, ROYCHOWDHURY15] présentent des résultats essentiellement exacts dans la limite thermodynamique (alors que la matrice de transfert est limitée aux systèmes de taille finie) lorsque les corrélations décroissent exponentiellement. Pour les systèmes critiques, il est nécessaire d’augmenter la « dimension de lien » (*bond dimension*), liée aux nombres de valeurs gardées dans la SVD, si l’on souhaite obtenir des corrélateurs à grande distance. Notons finalement que, tout comme la matrice de transfert, ces méthodes sont essentiellement limitées aux systèmes classiques 2d, car il n’existe pas de méthode efficace connue pour effectuer la contraction des tenseurs, même approximativement, en dimension supérieure.

Chapitre II. Étude Monte Carlo du modèle de dimères en interaction sur le réseau carré

Par les considérations simples du chapitre précédent, nous connaissons la physique du modèle Éq. (2) en deux points du diagramme de phase : à température infinie, le système est critique avec des fonctions de corrélations algébriques alors qu'à température nulle, le système est ordonné avec des configurations colonnaires minimisant l'énergie. Que se passe-t-il entre ces deux points ? Dans ce chapitre (basé en partie sur la Réf. [ALLET06B]), nous allons partiellement répondre à cette question à l'aide de simulations Monte Carlo avec l'algorithme de ver.

II.1. Phase basse température et paramètres d'ordre

Commençons tout d'abord par la phase basse température. La forme de l'interaction entre dimères conduit à une prolifération de plaquettes avec deux dimères parallèles. Nous nous attendons alors naturellement à une phase basse température brisant les mêmes symétries que les quatre fondamentaux de la Fig. 7. Un tel ordre, brisant à la fois les symétries de translation et de rotation de $\pi/2$, est appelé *ordre colonnaire*. Toutefois, la connaissance des modèles de dimères quantiques nous invite à considérer la stabilisation d'un *ordre de plaquette*, qui est décrit ci-dessous. Afin de déterminer quelles phases peuvent être rencontrées à basse température dans le modèle de l'Éq. (2), nous allons introduire trois paramètres d'ordre différents.

Description de l'ordre plaquette

Le modèle de dimères quantiques sur le réseau carré Éq. (1) possède, selon certains auteurs [LEUNG96, SYLJUASEN05, SYLJUASEN06], un ordre à longue portée de *plaquettes* dans une région de son diagramme de phase à température nulle, proche du point Rokhsar-Kivelson.

Dans une telle phase, il existe une brisure spontanée de symétrie où un quart des plaquettes du réseau carré accueille une paire de dimères qui résonnent (au sens quantique). Cet état brise l'invariance par translation mais conserve la symétrie par rotation de $\pi/2$ autour du centre de chaque plaquette. On trouvera représentée dans la Réf. [LEUNG96] une configuration typique de l'ordre plaquette.

Pour le système quantique, la phase plaquette a une énergie potentielle (diagonale) plus haute que le cristal colonnaire, mais les termes cinétiques (hors diagonaux) de résonances de dimères sur chaque plaquette occupée permettent de diminuer son énergie. Bien sûr, les termes cinétiques sont absents de notre modèle classique. Cependant, les fluctuations *thermiques* de positions des dimères autour de chaque plaquette flippable permettent de gagner de l'*entropie* (par rapport au cristal colonnaire) et donc de diminuer l'énergie libre. En effet, il est facile de créer une nouvelle configuration de type plaquette en retournant simplement une des plaquettes flippables. La compétition entre entropie et énergie (potentielle) dans le système classique est donc analogue à celle entre énergie cinétique et potentielle dans le modèle quantique. La phase plaquette constitue donc *a priori* un candidat naturel dans le diagramme de phase à température finie du modèle classique. Nous ré-utiliserons souvent par la suite cet argument de similarité entre l'entropie classique et l'énergie cinétique quantique. Celui-ci découle simplement du fait que les termes cinétiques quantiques et les fluctuations thermiques sont favorisés tous deux par les mêmes plaquettes flippables.

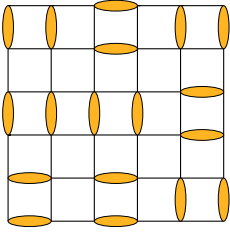


Fig. 12 Une configuration typique de la phase plaquette.

Une configuration typique de la phase plaquette est représentée dans la Fig. 12, où l'on voit clairement que la symétrie de translation est perdue, mais pas celle de rotation de $\pi/2$. Dans une phase plaquette, deux plaquettes flippables distantes sont essentiellement décorréelées : si la première possède deux dimères horizontaux par exemple, la seconde aura une probabilité identique d'accueillir deux dimères horizontaux ou verticaux (d'où la symétrie non brisée par rotation de $\pi/2$). Ceci n'est pas vrai pour des plaquettes proches qui sont nécessairement corrélées, définissant ainsi une longueur de corrélation

finie. Un état colonnaire peut alors être vu comme un état plaquette où cette longueur de corrélation plaquette-plaquette est devenue infinie, de sorte que toutes les plaquettes adoptent simultanément la même orientation. Un scénario possible (finalement exclu par les résultats Monte Carlo qui suivent) est que le cristal colonnaire présent à température nulle (et à basse température) fonde en deux étapes : d'abord en perdant uniquement la symétrie de translation, puis celle de rotation. Nous obtiendrions alors une phase intermédiaire de type plaquette.

Paramètres d'ordre

- Paramètre d'ordre colonnaire complexe

La phase colonnaire brise à la fois la symétrie de rotation par $\pi/2$ ainsi que la symétrie de translation par un pas du réseau, résultant en quatre fondamentaux différents représentés dans la Fig. 7. Un choix ingénieux pour définir un paramètre d'ordre qui tienne compte de cette dégénérescence a été proposé par SACHDEV [SACHDEV89], qui a construit un paramètre d'ordre colonnaire complexe $\Psi_{\text{col}}(\mathbf{r})$ au site \mathbf{r} :

$$\text{Éq. (3)} \quad \Psi_{\text{col}}(\mathbf{r}) = (-)^{r_x} [d^x(\mathbf{r}) - d^{-x}(\mathbf{r})] + i(-)^{r_y} [d^y(\mathbf{r}) - d^{-y}(\mathbf{r})].$$

En sommant $\Psi_{\text{col}}(\mathbf{r})$ sur un seul sous réseau $2/L^2 \langle \sum_{\mathbf{r} \in A} \Psi_{\text{col}}(\mathbf{r}) \rangle$ afin d'éviter une annulation par symétrie, on obtient un paramètre d'ordre de module maximal pour les quatre configurations colonnaires, où il prend les valeurs ± 1 et $\pm i$.

Nous pouvons définir de même la susceptibilité colonnaire associée

$$\chi_{\text{col}} = \frac{4}{L^2} (\langle |\sum_{\mathbf{r} \in A} \Psi_{\text{col}}(\mathbf{r})|^2 \rangle - \langle |\sum_{\mathbf{r} \in A} \Psi_{\text{col}}(\mathbf{r})| \rangle^2).$$

ainsi que le cumulante de Binder [BINDER81] colonnaire :

$$B_{\text{col}} = 1 - \frac{\langle |\Psi|^4 \rangle}{2 \langle |\Psi|^2 \rangle^2}$$

Ce cumulante de Binder a une valeur de saturation $1/2$ dans une phase ordonnée (au sens de $\Psi_{\text{col}}(\mathbf{r})$), et tend vers 0 dans une phase désordonnée à cause de la nature gaussienne des fluctuations dans une telle phase⁵.

Comme noté dans la Réf. [LEUNG96], Ψ_{col} (et les quantités associées) sont sensibles à la brisure de symétrie de translation indépendamment de la brisure de symétrie de rotation,

5 De manière générale pour un paramètre d'ordre gaussien m à n composantes, nous avons $\langle m^4 \rangle / \langle m^2 \rangle^2 = (n+2)/n$

et aura donc un module non nul dans une phase colonnaire mais aussi dans une phase plaquette. La *phase* de Ψ_{col} peut alors discriminer ces deux états, mais se trouve être une quantité assez bruitée dans les simulations numériques et peu pratique. Une autre possibilité consiste à regarder les *histogrammes* de Ψ_{col} au cours de la simulation Monte Carlo, mais cela se révèle peu efficace pour déterminer avec précision l'apparition de l'ordre. Nous devons recourir à d'autres indicateurs pour trancher entre la phase colonnaire et la phase plaquette, quantités que nous introduisons maintenant.

- **Paramètre d'ordre de rotation brisée**

À suffisamment haute température (au moins à température infinie), le système est symétrique par rotation de $\pi/2$: le nombre moyen de dimères verticaux est identique à celui des dimères horizontaux. Ceci reste vrai dans la phase plaquette, mais cette symétrie est perdue dans la phase colonnaire. Nous pouvons ainsi facilement construire un paramètre d'ordre de rotation brisée qui va nous permettre de distinguer ces deux phases en considérant [LEUNG96]

$$D = 2/L^2 |N^c(\text{---}) - N^c(\text{---})|$$

où $N^c(\text{---})$ (respectivement $N^c(\text{---})$) est le nombre de dimères horizontaux (respectivement verticaux) dans la configuration c . La normalisation est choisie de façon à ce que $D = 1$ pour les quatre états fondamentaux colonnaires de la Fig. 7. Comme pour le paramètre d'ordre colonnaire complexe, il est utile de considérer la susceptibilité $\chi_D = L^2(\langle D^2 \rangle - \langle D \rangle^2)$ et le cumulants de Binder $B_D = 1 - \langle D^4 \rangle / (3\langle D^2 \rangle^2)$ associés.

À noter qu'il est possible [LEUNG96] de définir un paramètre d'ordre qui va compter non pas la différence entre les diverses orientations possibles des dimères, mais celle entre les diverses orientations possibles des *plaquettes*. Les résultats obtenus avec ce paramètre d'ordre sont identiques à ceux obtenus avec D [ALET05].

- **Paramètre d'ordre plaquette**

Une discrimination positive de la phase plaquette est possible avec le paramètre d'ordre

$$P = 2/L^2 \left| \sum_{\mathbf{p}} (-)^{p_x+p_y} v_{\mathbf{p}} \right|$$

où la somme est prise sur toutes les plaquettes du réseau de coordonnées $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ et où $v_{\mathbf{p}} = 1$ si la plaquette de coordonnées \mathbf{p} contient deux dimères parallèles (et vaut 0 sinon). Cette quantité est l'équivalent du terme énergétique de l'Éq. (2), mais pris à un vecteur d'onde différent (π, π) . Le facteur alterné $(-)^{p_x+p_y}$ est constant dans un état plaquette « pur », et a été conçu pour annuler la somme dans un état colonnaire. En conséquence, la valeur moyenne $\langle P \rangle$ du paramètre d'ordre plaquette s'annulera dans une phase colonnaire, mais prendra une valeur non nulle à la limite thermodynamique dans une phase plaquette. Nous pouvons encore une fois définir la susceptibilité plaquette associée à ce paramètre d'ordre $\chi_P = L^2(\langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2)$ ainsi que le cumulants de Binder pour l'ordre plaquette $B_P = 1 - \langle P^4 \rangle / (3\langle P^2 \rangle^2)$.

Finissons cette section en notant que PAPANIKOLAOU *et al.* [PAPANIKOLAOU07] retrouvent (essentiellement) les mêmes paramètres d'ordre que ceux présentés ici, à partir de considérations élégantes de symétrie basées sur la théorie des champs sous-jacente (expliquée dans le Chapitre III).

Résultats numériques

Nous présentons dans cette section les résultats des simulations Monte Carlo (utilisant l'algorithme de ver) pour des systèmes de taille $L \times L$ avec des conditions aux bords périodiques, jusqu'à $L = 160$. Afin d'effectuer une comparaison visuelle, nous allons regrouper les courbes des paramètres d'ordre, des susceptibilités et des cumulants de Binder pour les trois paramètres d'ordre présentés précédemment.

- **Brisure de symétrie de rotation**

Considérons tout d'abord le paramètre d'ordre de rotation brisée, qui va s'avérer être le plus précis pour détecter la transition. Sa valeur moyenne $\langle D \rangle$ est représentée en fonction de la température T dans la Fig. 13a et sature clairement à sa valeur maximale à basse température. Les courbes pour différentes tailles de systèmes commencent à se séparer pour une température $T \sim 0.6$.

Afin de détecter plus finement la température critique T_c , inspectons le comportement de la susceptibilité χ_D et du cumulant de Binder B_D associés. χ_D possède un pic prononcé autour de $T \sim 0.63$ (Fig. 14a), qui indique l'apparition d'ordre à longue portée. Comme c'est souvent le cas, la température à laquelle χ_D est maximale varie légèrement avec la taille de système. Il est alors préférable d'utiliser le cumulant de Binder qui est connu pour permettre une estimation précise de T_c .

Le cumulant de Binder B_D sature à la limite thermodynamique vers la valeur attendue $2/3$ à basse température (Fig. 15a). Nous observons un croisement caractéristique des courbes pour différentes tailles de systèmes à une température unique bien définie, signalant l'entrée dans la phase basse température colonnaire. La température critique est estimée être $T_c = 0.65(1)$ à partir de cette courbe. Ces résultats indiquent aussi que l'ordre de plaquette n'est pas présent sous T_c (sinon le paramètre d'ordre $\langle D \rangle$ s'annulerait), mais laissent la possibilité de l'existence d'une phase plaquette à plus haute température.

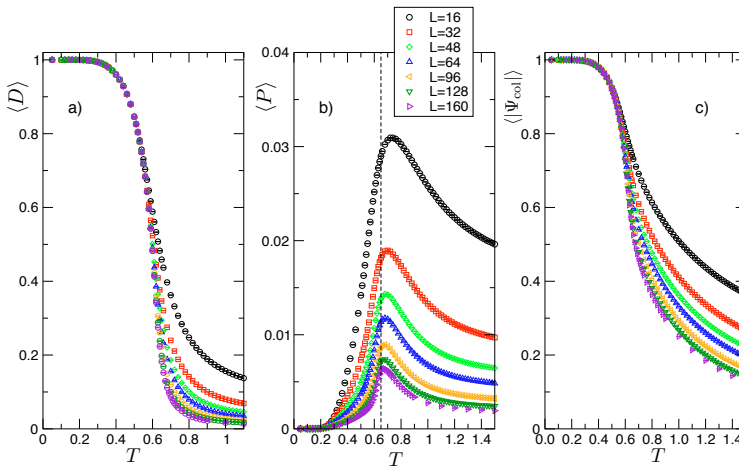


Fig. 13 En fonction de la température T pour différentes tailles de système : (a) Paramètre d'ordre de rotation brisée $\langle D \rangle$, (b) Paramètre d'ordre plaquette $\langle P \rangle$, (c) Module du paramètre d'ordre colonnaire $\langle |\Psi_{\text{col}}| \rangle$. La ligne pointillée indique $T_c = 0.65(1)$.

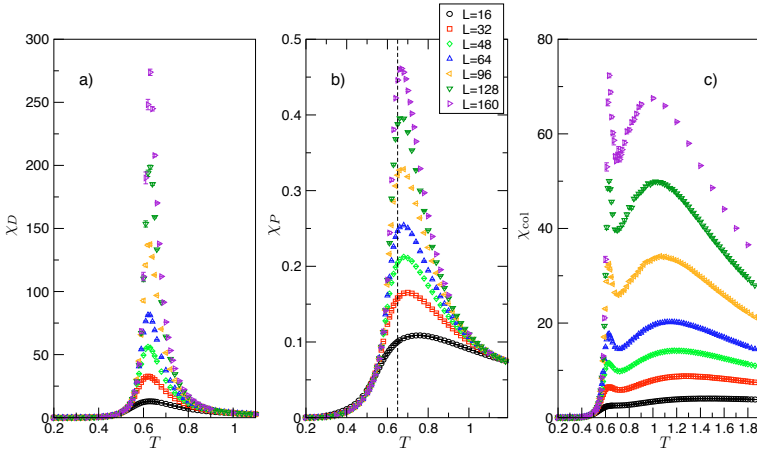


Fig. 14 En fonction de la température T pour différentes tailles de système : (a) Susceptibilité du paramètre d'ordre de rotation brisée χ_D , (b) Susceptibilité de plaquette χ_P , (c) Susceptibilité colonnaire χ_{col} . La ligne pointillée indique $T_c = 0.65(1)$.

• Corrélations plaquette

Intéressons-nous au paramètre d'ordre plaquette $\langle P \rangle$, qui montre un comportement non monotone en fonction de la température (Fig. 13b), avec une valeur maximale atteinte proche (toujours par valeur supérieure) de $T_c \sim 0.65$ pour toutes les tailles de systèmes.

La susceptibilité de plaquette χ_P possède quant à elle un pic légèrement au dessus de T_c (Fig. 14b) : ces deux résultats indiquent que les corrélations de type plaquette sont les plus fortes juste avant l'entrée dans la phase colonnaire à basse température.

Les valeurs atteintes par $\langle P \rangle$ sont petites et *diminuent* avec la taille du système. Les valeurs de χ_P sont elles aussi faibles comparées à celles atteintes par les autres susceptibilités (voir par exemple χ_D dans la Fig. 14a). Toutefois, un faible ordre plaquette à longue portée pourrait subsister à la limite thermodynamique. Ce scénario peu probable est complètement éliminé par le comportement du cumulatif de Binder de l'ordre plaquette (représenté dans la Fig. 15b) qui possède lui aussi un comportement non monotone avec la température. En diminuant la température, B_P commence à croître à partir de sa valeur nulle à température infinie, puis tombe soudainement à zéro pour une température légèrement supérieure à T_c . Ces résultats excluent bien évidemment une phase plaquette au dessus de la phase colonnaire.

En somme, des corrélations plaquette sont bel et bien présentes dans le modèle Éq. (2), commencent à se développer lorsque la température diminue, sont maximales juste au dessus de T_c , mais ne forment pas une phase thermodynamique stable car elles sont soudainement surpassées par l'ordre colonnaire. Toutefois, ces corrélations peuvent « polluer » l'analyse de taille finie d'autres quantités qui sont sensibles à l'ordre plaquette, comme c'est le cas du paramètre d'ordre complexe étudié dans le prochain paragraphe.

• Paramètre d'ordre colonnaire complexe

Finissons notre étude des ordres accessibles au système de dimères par celle du paramètre d'ordre colonnaire $\langle |\Psi_{\text{col}}| \rangle = \frac{2}{L^2} \langle |\sum_{\mathbf{r} \in A} \Psi_{\text{col}}(\mathbf{r})| \rangle$, qui était *a priori* le mieux placé pour décrire la phase basse température. C'est en effet très clairement le cas sur la Fig. 13c où

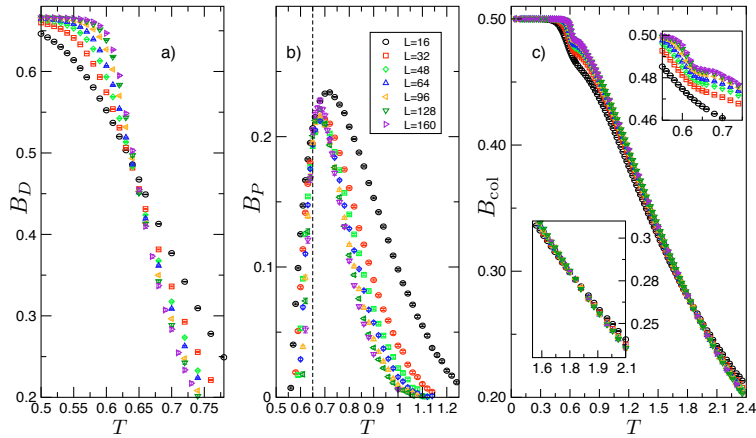


Fig. 15 En fonction de la température T pour différentes tailles de système : cumulants de Binder du paramètre d'ordre (a) de rotation brisée B_D , (b) plaquette B_P , (c) colonnaire B_{col} . La ligne pointillée indique $T_c = 0.65(1)$. Encart droit : agrandissement et anomalie proche de $T \sim 0.63$. Encart gauche : Agrandissement et pseudo-croisement proche de $T \sim 1.8$.

On voit l'ordre colonnaire se mettre en place à basse température, avec les courbes de différentes tailles se séparant autour de $T \sim 0.6$, comme cela était le cas pour le paramètre d'ordre de rotation brisée.

Comme précédemment, on s'attend à ce que la détermination précise de T_c soit plus facile en étudiant la susceptibilité et le cumulants de Binder associés au paramètre d'ordre colonnaire. La première surprise provient alors du comportement inattendu de la susceptibilité colonnaire χ_{col} en fonction de la température (Fig. 14c). χ_{col} présente deux pics : le premier est assez marqué et localisé autour de $T \sim 0.63$ alors que le second est plus large et se situe autour de $T \sim 1$. Il est important de remarquer qu'alors que le premier pic est le plus petit pour des systèmes de « petite » taille $L \leq 96$, la tendance est inversée aux grandes tailles. Cela peut indiquer que le second pic sature à une valeur finie dans la limite thermodynamique. Il est aussi possible que les deux pics se rassemblent pour en former un seul à la limite thermodynamique, ce qui n'est pas irréaliste étant donnée la tendance du maximum du second pic à se déplacer vers des valeurs de températures de plus en plus basses lorsque la taille du système augmente. Nous n'avons pas poussé les calculs pour des tailles suffisamment grandes pour tirer des conclusions définitives sur le comportement limite de χ_{col} . Le cumulants de Binder colonnaire représenté Fig. 15c présente lui aussi un comportement inhabituel : un croisement des courbes pour différentes tailles de système de nature extrêmement plate est observé pour $T \sim 1.8$ (voir l'agrandissement sur l'encart gauche de la Fig. 15c) ainsi qu'une anomalie marquée autour de $T \sim 0.63$ (voir l'agrandissement dans l'encart de droite).

Un croisement de courbes du cumulants de Binder pour différentes tailles de systèmes correspond d'habitude à une transition vers une phase ordonnée à longue portée pour le paramètre d'ordre en question. Cependant, le croisement observé ici à haute température est particulièrement plat et il est impossible avec la précision statistique donnée de distinguer un point de croisement précis pour les trois plus grandes tailles de systèmes. Le type de l'anomalie proche de $T \sim 0.63$ est quant à lui assez singulier : nous n'avons pas trouvé trace dans la littérature de mention d'une telle anomalie. Nous discuterons plus en détail du

comportement des différents cumulants de Binder dans la [Sec. III.2.5](#).

Les deux singularités dans χ_{col} et B_{col} pourraient signaler de façon hypothétique l'existence d'une phase intermédiaire. Toutefois, étant donnée la présence prouvée précédemment de corrélations plaquettes fortes (mais non à longue portée), il est probable que la singularité à haute température disparaisse dans la limite thermodynamique, alors que la première proche de $T \sim 0.63$ subsiste. En effet, alors que la susceptibilité et le cumulant de Binder colonnaires sont marqués à une température unique à basse température, les températures pour lesquelles χ_{col} et B_{col} présentent des anomalies sont différentes. Nous pensons donc que les corrélations plaquettes présentées plus haut affectent particulièrement l'analyse de taille finie des autres observables, et en particulier de la susceptibilité et du cumulant de Binder colonnaires. La susceptibilité de plaquette χ_P ne piquant pas exactement à la même température que celle où se situe le second pic de χ_{col} (bien que celle-ci varie avec la taille du système), cela pourrait ainsi indiquer la présence de corrélations fortes (autres que celles de type plaquette) au dessus de T_c .

En conclusion de cette section, le modèle [Éq. \(2\)](#) présente une transition unique à $T_c = 0.65(1)$ vers une phase colonnaire. Il n'existe pas de phase intermédiaire plaquette, mais les corrélations plaquettes sont fortes au dessus de T_c .

II.2. Thermodynamique de la transition

Le modèle [Éq. \(2\)](#) possède donc une transition de phase unique à $T_c = 0.65(1)$ entre une phase basse température colonnaire et une phase haute température décrite plus précisément plus bas. Nous utilisons maintenant des mesures thermodynamiques pour caractériser la nature de cette transition.

Cumulant de l'énergie

Nous considérons tout d'abord le cumulant de l'énergie [\[CHALLA86\]](#) :

$$V = 1 - \langle E^4 \rangle / 3 \langle E^2 \rangle^2. \tag{4}$$

Tant pour une phase désordonnée que pour une phase ordonnée, ce cumulant sature vers la valeur $2/3$ dans la limite thermodynamique [\[CHALLA86\]](#), la distribution d'énergie étant gaussienne dans les deux cas. Cette valeur de $2/3$ est aussi retrouvée dans la limite thermodynamique pour un point de transition du second ordre (mais pour des raisons différentes). Par contre, pour une transition du premier ordre, $V(T_c)$ admet un minimum non trivial et prend une valeur différente de $2/3$ dans la limite thermodynamique [\[CHALLA86\]](#). Cette valeur est *a priori* inconnue, étant donné le caractère non universel de la distribution d'énergie pour une transition de phase du premier ordre. Pour une transition de phase Kosterlitz-Thouless [\[KOSTERLITZ73\]](#), nous n'avons pas trouvé de prédictions pour le comportement de ce cumulant.

Un minimum pour $V(T)$ apparaît dans la [Fig. 16a](#) pour une température proche de T_c pour toutes les tailles de système, mais ce minimum tend vers $2/3$ dans la limite thermodynamique comme cela est très clairement visible dans l'encart de cette figure. Ce résultat *exclut* la possibilité d'une transition de phase du premier ordre. Le lecteur habitué aux simulations numériques l'avait déjà deviné en observant le croisement clair et régulier des cumulants de Binder de la [Fig. 15a](#).

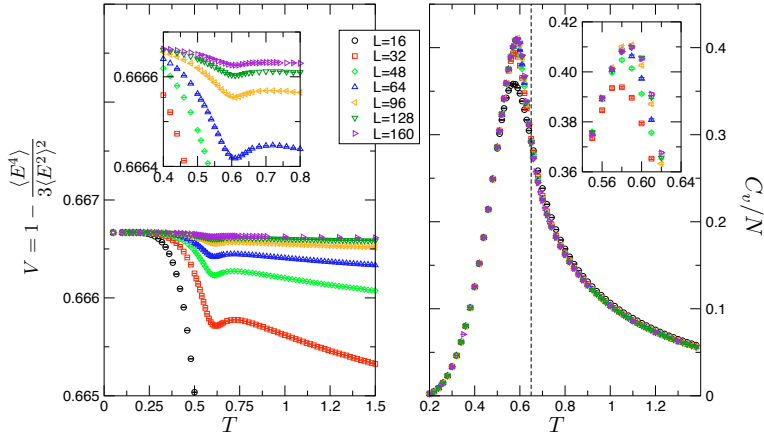


Fig. 16 a) Cumulant de l'énergie V en fonction de la température T pour différentes tailles de système. Encart : agrandissement pour les plus grandes tailles. b) Chaleur spécifique par site C_v/N en fonction de la température T pour différentes tailles de système. La ligne pointillée indique $T_c = 0.65(1)$. Encart : agrandissement sur le pic de chaleur spécifique.

Chaleur spécifique

Intéressons-nous maintenant à une grandeur typique des transitions de phase, la chaleur spécifique C_v , définie comme le second moment de l'énergie :

$$\text{Éq. (5)} \quad \frac{C_v}{N} = \frac{1}{N} \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{T^2}.$$

La chaleur spécifique par site C_v/N possède un pic assez « rond », qui ne diverge pas dans la limite thermodynamique, comme cela peut être remarqué dans la Fig. 16b et son encart. Ce pic est situé à une température $T \sim 0.59$ différente de la température critique $T_c = 0.65(1)$ (indiquée par la ligne pointillée dans la Fig. 16b). Pour une transition de phase du second ordre, nous nous attendrions à un comportement singulier à T_c : soit une divergence pour un exposant critique $\alpha > 0$, soit un point de rebroussement (*cusp*) pour $\alpha < 0$. Nos résultats indiquent que C_v est complètement régulière à T_c : c'est en fait une signature caractéristique d'une transition de phase de type *Kosterlitz-Thouless* (KT) [KOSTERLITZ73]. Nous allons comprendre que ce type de transition est naturel, une fois comprise la nature de la phase haute température étudiée dans la section suivante.

II.3. Phase haute température et fonctions de corrélation

Comme précisé dans l'introduction, le point à $T = \infty$ du modèle Éq. (2) correspond au problème classique de pavage du réseau carré par des dimères. Le système y est critique, avec des fonctions de corrélation qui décroissent en loi de puissance avec la distance [FISHER63]. Il est naturel de se demander ce que deviennent ces corrélations à température finie $T \in]T_c, \infty[$.

Fonctions de corrélations dimère-dimère

Commençons par les fonctions de corrélation entre dimères. Nous avons calculé deux

types de corrélateurs pour des dimères parallèles, selon l'orientation relative du vecteur les séparant. Le premier est le corrélateur longitudinal

$$G^l(x) = \langle d^x(\mathbf{r})d^x(\mathbf{r} + (x, 0)) \rangle^c,$$

où l'on regarde la corrélation entre deux dimères (pour l'exemple) horizontaux séparés par une distance x sur la même ligne. Le second est le corrélateur transverse :

$$G^t(x) = \langle d^x(\mathbf{r})d^x(\mathbf{r} + (0, x)) \rangle^c,$$

où les deux dimères toujours horizontaux sont cette fois-ci sur la même colonne. Les dimères sont pris ici horizontaux sans perte de généralité, mais nous appliquons bien entendu toutes les opérations de symétrie (au sujet de l'orientation des dimères, de la direction du vecteur les séparant ainsi que de translation) pour améliorer la statistique numérique.

À $T = \infty$, les calculs exacts de la Réf. [FISHER63] fournissent les résultats asymptotiques $G^l(x) = (-)^x \frac{1}{\pi^2 x^2} + O(x^{-3})$, ainsi que $G^t(x) = \frac{1}{\pi^2 x^2} + O(x^{-3})$ pour x impair et $G^t(x) = -\frac{1}{\pi^2 x^4} + O(x^{-6})$ pour x pair.

Pour toute température finie $T \geq T_c$, les calculs Monte Carlo indiquent que la fonction de corrélation longitudinale $G^l(x)$ reste alternée avec x , et maintient son comportement algébrique avec un exposant de décroissance α_d qui varie *continûment* avec la température T

$$G^l(x) = (-)^x A(T)x^{-\alpha_d(T)}$$

à grand x , $A(T)$ étant une amplitude qui dépend elle aussi de la température. Sur la Fig. 17a est représentée $(-)^x G^l(x)$ (le facteur alterné compensant celui trouvé dans $G^l(x)$) pour quatre température différentes $T = 1, 2, 3$ et $T = \infty$. L'échelle log-log de la figure met en valeur la décroissance en loi de puissance de cette fonction, décroissance qui s'arrête autour de $L/2$ à cause des conditions aux bords périodiques imposées dans la simulation (la taille linéaire de l'échantillon considéré ici est $L = 512$). La valeur de l'exposant de décroissance $\alpha_d(T)$ peut être estimée à partir de cette figure, cependant la symétrie autour de $L/2$ due aux conditions aux bords périodiques rend sa détermination précise difficile car dépendante de l'étendue de la région considérée pour la régression (*fit*) linéaire. La situation peut être améliorée en utilisant les résultats issus de la théorie conforme, encore faut-il montrer que le système considéré possède bien l'invariance conforme. Nous préférons utiliser des méthodes alternatives décrites dans le prochain chapitre pour mesurer efficacement α_d et les exposants de décroissance en général. Ces estimations seront bien sûr entièrement compatibles avec celles que l'on aurait obtenues par un fit direct des corrélateurs représentés dans la Fig. 17a, elles seront simplement plus précises.

Regardons maintenant l'autre corrélateur transverse $G^t(x)$ représenté dans la Fig. 17b pour les mêmes températures. Nous observons là aussi une loi de puissance, et trouvons le même exposant de décroissance $\alpha_d(T)$ que pour la fonction de corrélation longitudinale : en fait, $(-)^x G^l(x)$ et $G^t(x)$ coïncident quasi-parfaitement pour x grand. Pour le corrélateur transverse, de légères déviations où les données pour x pair ou impair ne sont pas exactement identiques sont visibles (par exemple pour $x < 10$ dans la Fig. 17b). Cette distinction pair/impair était déjà présente dans les résultats analytiques à $T = \infty$ et se voit confirmer ici.

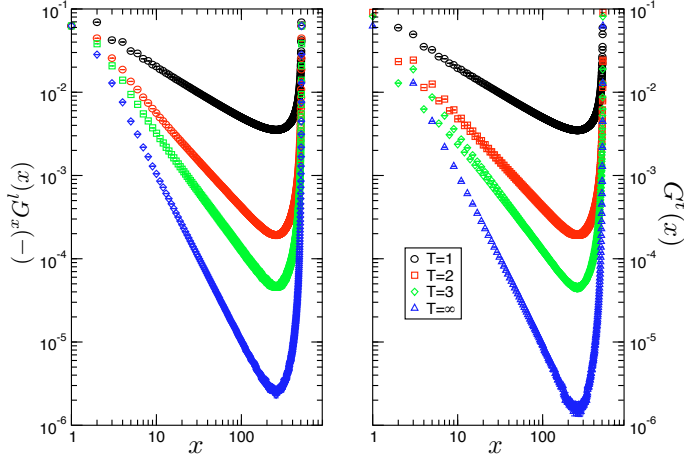


Fig. 17 En échelle log-log et pour quatre températures $T > T_c$: a) Fonction de corrélation dimère-dimère longitudinale alternée $(-)^x G^l(x)$ en fonction de la distance x entre dimères. (b) Fonction de corrélation dimère-dimère transverse $G^t(x)$ en fonction de la distance x entre dimères. Dans le cas $T = \infty$, les données pour x pair ne sont pas représentées car négatives (voir formule analytique dans le texte).

Nous parvenons à décrire correctement les données avec l'expression suivante :

$$\begin{aligned} G^t(x) &= A(T)x^{-\alpha_d(T)} && \text{pour } x \text{ impair} \\ G^t(x) &= A(T)x^{-\alpha_d(T)} + B(T)x^{-\omega(T)} && \text{pour } x \text{ pair} \end{aligned}$$

où $A(T)$ est la même amplitude que celle du corrélateur longitudinal. $B(T)$ est une constante négative et $\omega(T)$ une correction sous-dominante pour x pair. Les fits numériques fournissent une estimation grossière $\omega(T) \sim 2$.

Fonctions de corrélations monomère-monomère

Considérons pour finir l'autre type de corrélateur, celui entre monomères. Encore une fois, les monomères sont par définition exclus du modèle, mais nous pouvons calculer la fonction de corrélation $M(\mathbf{r})$ entre deux monomères tests immergés dans une configuration de dimères. $M(\mathbf{r})$ est calculé par l'algorithme Monte Carlo de ver, et pour simplifier nous ne considérerons par la suite que le cas de deux monomères sur la même ligne, c'est-à-dire $\mathbf{r} = (x, 0)$.

À $T = \infty$, nous connaissons le résultat exact $M(x) \propto x^{-1/2}$ dans la limite thermodynamique. Au dessus de T_c , les résultats Monte Carlo pour $M(x)$ sont représentés en fonction de x dans la Fig. 18. Nous avons utilisé les mêmes quatre températures que pour les fonctions de corrélations entre dimères, et notamment le même code de couleurs. L'échelle log-log de cette figure nous montre encore une fois que $M(x)$ décroît en loi de puissance, avec un exposant $\alpha_m(T)$ qui varie lui aussi continûment avec la température:

$$M(x) \propto x^{-\alpha_m(T)}$$

Pour les mêmes raisons techniques que celles invoquées dans le cas des corrélateurs entre dimères, nous ne donnons pas pour l'instant de valeur l'exposant de décroissance $\alpha_m(T)$ et réservons une estimation pour le chapitre suivant. Nous notons toutefois que les Fig. 17 et Fig. 18 indiquent clairement que $\alpha_d(T)$ et $\alpha_m(T)$ ont un comportement *opposé* avec la tem-

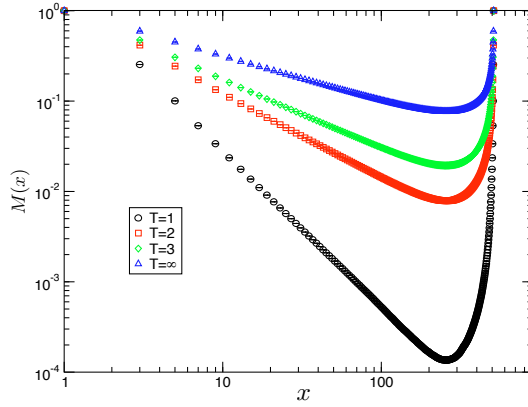


Fig. 18 Corrélateur monomère-monomère $M(x)$ en fonction de la distance x entre monomères pour quatre températures $T > T_c$ (échelle log-log).

érature : $\alpha_d(T)$ décroît lorsque T diminue alors que $\alpha_m(T)$ augmente. Les valeurs exactes à $T = \infty$ (où $\alpha_d(T) = 2$ et $\alpha_m(T) = 1/2$) nous invitent à deviner une relation simple entre ces deux exposants. Nous la trouverons dans le chapitre suivant, qui présente la théorie des champs relative au modèle de dimères Éq. (2).

Chapitre III. Théorie des champs et analyse gaz de Coulomb

Récapitulons les résultats Monte Carlo obtenus dans le chapitre précédent sur le modèle de dimères en interaction sur le réseau carré Éq. (2). Pour $v < 0$, nous observons une transition de phase entre une phase basse température cristalline et une phase haute température critique, avec des exposants « flottants » (c.-à-d. qui varient continûment avec la température). Bien que d'autres types de corrélations aient été trouvées (telles que des corrélations plaquettes), il n'y a pas de phase intermédiaire. La transition est de type Kosterlitz-Thouless. Le lecteur habitué de la physique statistique trouvera une telle description assez familière : en effet, l'existence d'une phase critique, les exposants flottants, la transition KT ainsi que la dimension $d=2$ du modèle suggèrent la physique du gaz de Coulomb (GdC). Dans ce chapitre, nous allons mettre en place une telle description en décrivant une transformation (non exacte) du modèle de dimères en interaction vers un gaz de Coulomb, ce qui nous permettra d'expliquer l'ensemble du diagramme de phases. Grâce à l'utilisation des résultats de théorie conforme et de calculs de matrice de transfert, nous pourrons de plus déterminer avec grande précision les exposants critiques $\alpha_d(T)$ et $\alpha_m(T)$ ainsi que la constante de couplage du gaz de Coulomb associé. Nous discuterons enfin de la pertinence de ces résultats pour d'autres problèmes cousins de physique statistique, ainsi que pour les modèles de dimères quantiques.

III.1. Modèle de hauteur et action effective

Action effective

Pour obtenir une image en termes de GdC ainsi qu'une théorie effective du modèle de dimères, nous allons ré-utiliser une notion introduite dans le Chapitre I, celle de la hauteur de configurations de dimères. Nous avons vu que pour chaque configuration de dimères, nous pouvions construire une configuration de hauteur, un nombre scalaire associé à chaque plaquette du réseau.

La première étape est celle de *coarse-graining* : pour chaque configuration de dimères, moyennons la hauteur sur plusieurs plaquettes proches au sens d'une certaine échelle de longueur. Puis répétons la même opération sur la nouvelle configuration de hauteur moyennée ainsi obtenue, et ainsi de suite jusqu'à la limite continue. Nous intégrons ainsi les fluctuations à courte distance de la hauteur microscopique, pour obtenir une hauteur *coarse-grainée* $h(\mathbf{r})$ définie dans le continu. La seconde étape consiste à admettre que la hauteur h est le « bon » champ, c.-à-d. qu'il suffit pour écrire une action effective qui puisse décrire correctement la physique observée. Il n'existe pas de preuves pour cela, seul le succès de ce choix que nous verrons par la suite nous permet de le légitimer.

Finalement, il faut écrire une action effective $S_{\text{eff}}[h]$ dans le continu pour le champ de hauteur. Il y a plusieurs façons de le faire. Une manière empirique mais systématique a été proposée par HENLEY et collaborateurs [KONDEV95, KONDEV96, RAGHAVAN97, ZENG97], en étudiant les états idéaux, qui sont les états les mieux connectés entropiquement. Une façon alternative et originale uniquement basée sur des considérations de symétrie a été proposée dans la Réf. [ALET06B] par G. MISGUICH. Une autre manière de construire l'action effective est de partir de résultats mathématiques exacts [KENYON09] sur la limite continue de pavages de dimères

(sans interaction), puis d'ajouter à la main un terme qui minimise l'énergie d'interaction du modèle Éq. (2). Toutes ces approches aboutissent à la même action effective $S_{\text{eff}}[h]$.

Au lieu de décrire ces différentes approches en détail, nous allons par la suite simplement formuler $S_{\text{eff}}[h]$ et discuter en profondeur de sa signification physique et ses implications. Le lecteur intéressé par la dérivation de cette action est invité à consulter les références précédemment citées. L'action effective se révèle être de type sine-Gordon et s'écrit :

$$S_{\text{eff}} = \int d\mathbf{r} \pi g |\nabla h(\mathbf{r})|^2 + V_p \cos(2\pi p h(\mathbf{r})) \quad \text{Éq. (6)}$$

où les valeurs des paramètres g , p et V_p seront précisées ultérieurement. Commençons par expliquer quels termes ne sont *pas* présents. Par sa définition même et pour obtenir une action effective locale (ce qui est implicite dans la construction de coarse-graining), l'action effective doit avoir une périodicité de 1 pour la hauteur. Nous pouvons aller plus loin : les symétries de translation et de rotation imposent en effet des contraintes très fortes sur l'action effective du champ de hauteur coarse-grainé, notamment d'être une fonction périodique de période 1/4 et d'être indifférente au signe de h [АЛЕТ06Б]. La périodicité $h \leftrightarrow h + 1/4$ dans l'action effective sélectionne automatiquement les dérivées de h , et les fonctions périodiques de h , de type $\cos(2\pi p h)$ avec p multiple de 4. De même, la symétrie $h \leftrightarrow -h$ dans l'action effective interdit les termes linéaires en h , et notamment un gradient simple.

Les termes les plus simples qui subsistent sont bien ceux que nous retrouvons dans l'action effective : un terme proportionnel au carré du gradient de h , et un terme périodique en $\cos(2\pi p h)$ avec $p = 4$. Interprétons physiquement ces termes.

Terme de rigidité $g\pi|\nabla h(\mathbf{r})|^2$

Le premier terme de type élastique $g\pi|\nabla h(\mathbf{r})|^2$ est un terme purement *entropique*, qui favorise les états *plats* : uniformes dans l'espace et sans variation de hauteur. Revenons à des considérations microscopiques pour justifier cette dernière affirmation et comprendre ce que sont ces états plats. Écrivant les valeurs de hauteurs pour les états colonnaires de la Fig. 7, on s'aperçoit facilement que la hauteur varie peu (sauf ultra localement) et qu'après une première étape de coarse-graining, la hauteur est essentiellement constante. En prenant arbitrairement une valeur initiale de la hauteur $h = 0$ sur une plaquette dans un coin du réseau, les quatre états colonnaires ont respectivement une hauteur moyenne de $\bar{h} = \frac{1}{8}, \frac{3}{8}, \frac{5}{8}$ et $\frac{7}{8}$. Les états colonnaires sont donc bien plats. Par contre, en reprenant le même raisonnement pour les états dits alternés de la Fig. 19, on voit que la hauteur (coarse-grainée) augmente linéairement le long d'une direction, et le gradient de hauteur est donc fini (et fort). Ce type

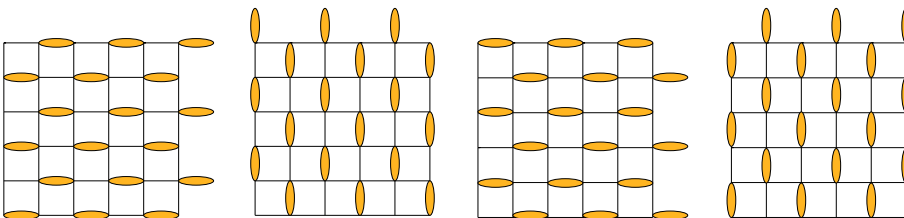


Fig. 19 Configurations alternées sur le réseau carré.

de configuration fortement non plate est appelée *tiltée*, dans le langage de la hauteur.

Ces deux types de configurations (colonnaires et alternées) sont bien différentes, comme on peut s'en apercevoir rapidement visuellement. Ceci se voit donc aussi en termes de hauteur, qui est une grandeur *coarse-grainée*. Y-a-t-il une quantité microscopique qui permette elle aussi de les distinguer ? En fait, il en existe deux, et la relation entre ces deux quantités ainsi que leur propre relation avec la hauteur permettent d'éclaircir considérablement notre compréhension de l'action effective. La première quantité saute aux yeux en regardant les Fig. 7 et Fig. 19 : les configurations colonnaires ont un grand nombre de plaquettes flip-pables (maximal en fait), alors que les configurations alternées n'en ont aucune ! La seconde quantité a déjà été introduite : il s'agit des nombres de winding qui sont conservés dans les deux directions d'espace. Un calcul rapide montre que les configurations colonnaires ont un couple de winding nul $W_x = W_y = 0$, alors que le nombre de winding dans une direction est maximal et l'autre nul pour une configuration alternée (par exemple $W_x = L/2$ et $W_y = 0$ pour la première configuration de la Fig. 19).

En regardant de plus près les façons de construire la hauteur et le nombre de winding pour une configuration alternée, on s'aperçoit que le nombre de winding n'est rien d'autre que la *pente moyenne* de la hauteur. Nous tenons donc une des relations : les états plats ont des nombres de winding nuls, alors que les états tiltés ont un nombre de winding non nul (ce nombre variant graduellement jusqu'à être maximal pour les états alternés). Mais nous ne savons toujours pas pourquoi les états plats seraient plus favorisés par l'action que les états tiltés, et pourquoi cela s'effectuerait au nom de l'entropie. Ceci peut être simplement compris avec l'autre quantité microscopique évoquée : la « *flippabilité* » des états. Les états colonnaires (et en fait tous les états plats) possèdent un grand nombre de plaquettes flip-pables : il est donc particulièrement facile de créer d'autres configurations de dimères à partir d'un état colonnaire, simplement en retournant une ou plusieurs plaquettes. Il s'agit du même argument entropique que celui évoqué pour la phase plaquette de la Sec. II.1.1. Les états colonnaires-plats sont donc très fortement connectés entropiquement : ce sont les états les plus nombreux. Par contre, il y a très peu d'états (en fait aucun dans le cas alterné) qui sont reliés entropiquement aux états tiltés. Ceci justifie donc que l'action effective, avec son premier terme $|\nabla h(\mathbf{r})|^2$, favorise les états plats par rapport aux états tiltés pour des raisons entropiques. Il est possible de dériver rigoureusement ce terme dans le continu pour des dimères sans interaction avec des techniques de physique mathématique [KENYON09].

Les états plats sont plus nombreux que les états tiltés, mais de combien exactement ? L'action effective nous permet de répondre à cette question en remarquant que la probabilité d'être dans une configuration tiltée avec un couple de winding non nul est exponentiellement plus faible que dans le secteur plat : $P(W_x, W_y) \propto \exp(-g\pi(W_x^2 + W_y^2))$.

Le premier terme de l'action effective nous indique certes que le secteur plat est le plus important, mais il y règne encore une grande dégénérescence. Nous reviendrons sur les conséquences physiques de cette dégénérescence. On peut se demander quels sont les états les plus favorisés à l'intérieur de ce secteur. Naturellement, on s'attend à ce que cela soit les états colonnaires car ils sont particulièrement bien connectés entropiquement (ce sont les états « idéaux » de HENLEY [KONDEV95, KONDEV96, RAGHAVAN97, ZENG97]). C'est en effet le cas, et c'est le second terme de l'action effective qui va nous le signifier.

Jusqu'ici, la constante $g\pi$ devant ce terme est complètement arbitraire (non fixée), et dépend de plus de la convention prise pour définir les sauts de hauteur. C'est pourquoi les notations

et les valeurs de cette constante diffèrent selon les auteurs⁶. Nous avons choisi une notation qui s'avérera pratique pour la description future du système en termes d'un gaz de Coulomb. Seuls des résultats extérieurs (exactes ou numériques) sur le modèle microscopique nous permettront de fixer la valeur de cette constante.

Terme d'accrochage $V_p \cos(2\pi p h(\mathbf{r}))$

Le second terme en $\cos(2\pi p h)$ est appelé potentiel d'accrochage (de *locking*) car il nous permet de forcer la quantification précise de la hauteur, et par la même effectuer une sélection supplémentaire parmi les états plats. L'origine de ce terme est à la fois entropique et énergétique.

L'aspect entropique provient tout simplement du fait que les symétries du système *sans interaction* imposent d'avoir p multiple de 4 (voir plus haut). L'aspect énergétique est tout aussi simple, puisque pour $V_p > 0$, le potentiel d'accrochage a p minima pour $h = (1 + 2i)/2p$ (où i est un entier entre 0 et $p - 1$). Pour le réseau carré, les quatre configurations colonnaires qui minimisent l'interaction entre les dimères correspondent précisément à ces minima avec $p = 4$. Les valeurs moyennes \bar{h} de la hauteur pour ces quatre fondamentaux sont en effet bien égales aux minima du potentiel pour $p = 4$: $\bar{h} = \frac{1}{8}, \frac{3}{8}, \frac{5}{8}, \frac{7}{8}$. Le terme énergétique nous impose donc $p = 4$ (et $V_p > 0$).

Compétition entre les deux termes

Le lecteur habitué aura reconnu dans le terme en gradient un *champ libre* : cela nous indique en particulier que ce terme ne favorise pas uniquement les configurations entièrement plates, mais permet à des configurations avec une pente non nulle de subsister. En présence seule de ce premier terme, le système serait dans une phase critique *rugueuse*, où la hauteur fluctue. Par simple transformée de Fourier, on trouve que la fonction de corrélation hauteur-hauteur s'écrit $\langle (h(\mathbf{r}) - h(\mathbf{0}))^2 \rangle = C + 4/g \ln(\mathbf{r})$, avec C une constante. HENLEY retrouve ce résultat de façon élégante [HENLEY97] à partir des résultats exacts pour les fonctions de corrélation dimère-dimère sans interaction.

Le potentiel d'accrochage favorise quant à lui plus spécifiquement p valeurs précises de la hauteur uniforme, correspondant à certaines configurations plates. Ces deux termes entrent donc dans la compétition *rugueux versus plat*, bien connue en physique des surfaces. Dans quel régime un terme est dominant par rapport à l'autre ?

En reconnaissant dans l'Éq. (6) une action *sine-Gordon*, nous pouvons importer les résultats bien connus du groupe de renormalisation [COLEMAN75] qui indiquent la pertinence du terme en cosinus en fonction de sa période p et de la constante de rigidité g (ce calcul est reproduit dans un appendice de la Réf. [ALET06B]). Le potentiel d'accrochage est pertinent et gèle la hauteur dans une des p valeurs lorsque $g > p^2/4$ (phase plate), alors qu'il se renormalise vers zéro pour $g < p^2/4$. Dans ce cas, la théorie à longue distance est le simple champ libre et le système est critique (phase rugueuse). La transition entre ces deux phases est de type Kosterlitz-Thouless.

Tout ceci est en accord qualitatif avec les observations numériques : pour les dimères, la phase plate correspond à la phase colonnaire, la phase rugueuse est la phase critique et la transition est bien de type KT. Ce scénario laisse imaginer que la constante de rigidité g varie avec la température du système. La courbe $g(T)$ est inconnue, nous pouvons simple-

⁶ La notation utilisée ici est différente de celle des travaux de HENLEY et collaborateurs qui dénotent la constante de rigidité K . La relation entre les deux notations est $g = 8K/\pi$

ment supposer que sans interaction (à $T = \infty$), on a $g < 4$ (sinon le système serait dans une phase plate alors que nous savons qu'il est critique pour les dimères). Nous savons que le problème de dimères sans interaction est équivalent à un problème de fermions libres, donc on peut phénoménologiquement deviner que $g = 1/2$ à $T = \infty$ (il s'agit de la valeur pour des fermions libres). Cette intuition sera vérifiée plus tard.

Mais nous souhaitons aller plus loin, et notamment comparer les résultats des fonctions de corrélations obtenus numériquement avec les prédictions théoriques. On peut aussi se demander si l'on peut calculer numériquement la constante de couplage g et vérifier que sa valeur critique est bien $g_c = p^2/4$. Pour cela, il est utile d'effectuer une transformation vers un gaz de Coulomb.

III.2. Gaz de Coulomb

Réduction à un Gaz de Coulomb

Il est bien connu que le modèle de sine-Gordon Éq. (6) est équivalent dans le continu à un gaz composé d'un type de charges en interaction coulombienne. Cette transformation vers le Gaz de Coulomb se retrouve dans la revue de NIENHUIS [NIENHUIS87] sur le GdC et dans l'appendice de la Réf. [ALET06B]. L'intérêt de cette transformation est de replacer le modèle de dimères étudié dans un contexte plus large. Notamment, le GdC fournit un formalisme pour comprendre l'impact qu'aurait l'inclusion de monomères dans un tel modèle (ce qui n'est pas possible directement avec la simple action sine-Gordon Éq. (6)), mais aussi pour calculer simplement les exposants de décroissance de plusieurs fonctions de corrélations.

Dans cette transformation, le champ de hauteur (qui essentiellement encode la physique des dimères) est conjugué à la densité de charges *électriques*. Des défauts éventuels de dislocations dans le champ de hauteur correspondent à des charges *magnétiques* duales. Ces charges magnétiques vont permettre bien évidemment de décrire les monomères, qui sont des défauts topologiques dans le « champ » de dimères. Ces monomères sont absents par définition du modèle mais peuvent être insérés à la main comme nous l'avions fait dans les simulations Monte Carlo. Plus précisément, un monomère est équivalent à une charge magnétique $|m| = 1$, correspondant à une dislocation de $\pm 2\pi$ dans le champ de hauteur. Le signe de m est donné par le sous-réseau dans lequel est inclus le monomère.

Nous détaillerons plus loin la correspondance entre les objets et opérateurs du GdC et le modèle microscopique. Énonçons tout d'abord plusieurs résultats célèbres du GdC sur les opérateurs de charge. Le GdC décrit des systèmes *critiques*, avec des fonctions de corrélations algébriques.

L'insertion d'une particule électromagnétique (e, m) (c.-à-d. avec une charge électrique e et une charge magnétique m) est décrite par un opérateur ayant une dimension d'échelle $X(e, m)$. L'exposant de la fonction de corrélation associée⁷ vaut [NIENHUIS87] :

$$\text{Éq. (7)} \quad \alpha(e, m) = e^2/g + gm^2$$

où g est maintenant reconnue comme la *constante de couplage* du GdC. La normalisation du champ de hauteur et de g dans l'Éq. (6) ont été choisies de façon à ce que e et m soient des entiers, comme dans la revue Réf. [NIENHUIS87].

⁷ Pour la suite, nous appellerons indifféremment exposant celui de la fonction de corrélation charge-charge $\alpha(e, m)$ ou la dimension d'échelle $X(e, m)$. Il y a un simple facteur 2 entre les deux : $\alpha(e, m) = 2X(e, m)$

Prédictions pour les exposants de décroissance

Comment relier les opérateurs du CdG (dont nous connaissons maintenant les dimensions) aux objets microscopiques du modèle ? Dans certains cas, l'identification peut être faite formellement. Dans le CdG, l'opérateur de *vertex* $V_e(\mathbf{r}) = \exp(2\pi e h(\mathbf{r}))$ décrit l'insertion d'une charge électrique e . D'un autre côté, on peut montrer [FRADKIN04] à l'aide de la solution exacte du modèle de dimères sans interactions que l'opérateur nombre d'occupation du dimère $d^\alpha(\mathbf{r})$ s'écrit :

$$\begin{aligned} d^x(\mathbf{r}) &= \frac{1}{4} + (-)^{r_x+r_y} \partial_y h(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} [(-)^{r_x} \exp(2i\pi h(\mathbf{r})) + \text{c.c.}] \\ d^y(\mathbf{r}) &= \frac{1}{4} + (-)^{r_x+r_y+1} \partial_x h(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} [(-)^{r_y} \text{i.} \exp(2i\pi h(\mathbf{r})) + \text{c.c.}] \end{aligned} \tag{8}$$

Ces expressions permettent de retrouver les résultats asymptotiques exacts de la fonction de corrélation dimère-dimère $\langle d^\alpha(\mathbf{0}) d^\beta(\mathbf{r}) \rangle$, en prenant $g = 1/2$. Le premier terme $1/4$ est la densité moyenne de dimères. Le second terme en gradient s'interprète assez facilement connaissant la règle de hauteur : dans un pavage de dimères, la hauteur varie à chaque fois que l'on croise un dimère. Le troisième terme quant à lui va nous permettre de faire la correspondance : c'est un opérateur de vertex électrique avec charge $|e| = 1$. Grossièrement, on peut dire que dans le continu, un dimère est représenté par une charge électrique $|e| = 1$.

Il est possible de décrire en termes d'opérateurs de vertex d'autres quantités microscopiques : ainsi PAPANIKOLAOU et collaborateurs [PAPANIKOLAOU07] ont dérivé les opérateurs de vertex pour le paramètre d'ordre colonnaire et celui de rotation brisée. De même, l'opérateur nombre de monomère va être décrit dans le continu par un opérateur de vertex magnétique $V_m(\mathbf{r}) = \exp(2i\pi m \tilde{h}(\mathbf{r}))$ avec $m = \pm 1$, où \tilde{h} est le champ dual de celui de hauteur.

Ces identifications nous permettent d'appliquer immédiatement l'Éq. (7) pour obtenir les prédictions du GdC pour les exposants de décroissance des fonctions de corrélation d'intérêt. Puisqu'un dimère correspond à une charge électrique $|e| = 1$, la fonction de corrélation dimère-dimère $\langle d^\alpha(\mathbf{0}) d^\beta(\mathbf{r}) \rangle$ doit décroître avec un exposant $\alpha_d = \alpha(1, 0) = 1/g$. De même, la fonction de corrélation monomère-monomère doit décroître avec un exposant $\alpha_m = \alpha(0, 1) = g$.

La constante de couplage g doit varier avec la température T dans le modèle microscopique pour permettre de comprendre que les exposants α_d et α_m dépendent de T , comme observé dans la Sec. II.3. L'analyse ci-dessus reste valide dans toute la phase critique, et on obtient en particulier la prédiction $\alpha_d = 1/\alpha_m$, indépendamment de T . Comme cela est habituel pour un GdC, la variation de g avec la température n'est pas connue. Celle-ci sera obtenue numériquement par matrice de transfert (Sec. III.2.4) et Monte Carlo (Sec. III.2.5). À température infinie toutefois, les résultats exacts de la Réf. [FISHER63] fixent $g(T = \infty) = 1/2$, et l'on vérifie bien qu'ici $\alpha_d = 1/\alpha_m = 2$.

Un autre intérêt du GdC est qu'il permet de vérifier rapidement la pertinence du potentiel d'accrochage $V_p \cos(2\pi p h(\mathbf{r}))$ dans l'action effective Éq. (6). C'est un opérateur de vertex électrique $e = p$ avec une dimension d'échelle $X(p, 0) = \alpha(p, 0)/2 = p^2/2g$, qui sera pertinent dès que $X(p, 0) < 2$, soit $g > g_c = p^2/4$. On retrouve bien le résultat du groupe de renormalisation du modèle de sine-Gordon [COLEMAN75]. Pour le modèle précis Éq. (2), nous avons $p = 4$ et la constante de couplage du GdC va croître de sa valeur $g = 1/2$ à $T = \infty$ vers $g(T_c) = g_c(p = 4) = 4$ au point critique. Cette analyse indique aussi que nous avons

correctement négligé les termes d'accrochage avec $p > 4$ puisqu'ils sont moins pertinents.

Dérivation alternative du gaz de Coulomb

Pour décrire ce GdC, nous sommes partis de la phase critique à haute température. Il est possible d'obtenir le même GdC en partant de la phase basse température (avec une approche certes plus phénoménologique). Le système admet une dégénérescence 4 du fondamental. À basse température, un système fini est composé essentiellement de grands domaines où tous les dimères sont alignés dans un des quatre états colonnaires de la Fig. 7. En associant à chaque orientation de domaine une orientation d'un spin « *clock* » pouvant prendre $q = 4$ valeurs, on s'attend naïvement à trouver une transition dans la classe d'universalité du modèle *clock* à $q = 4$ états. Ce modèle est bien connu pour être équivalent à un GdC avec des charges magnétiques (non contraintes) et des charges électriques multiples de q [NIENHUIS87]. La différence fondamentale ici est que l'absence de monomères dans le modèle original interdit l'existence de sites isolés autour desquels le spin effectuerait une rotation de 2π en passant par les quatre états colonnaires possibles. Ce schéma est joliment illustré dans un autre contexte dans la Réf. [LEVIN04]. En d'autres termes, il s'agit d'un modèle *clock* à $q = 4$ états *sans défauts topologiques*. Les charges magnétiques sont alors interdites dans le GdC associé. Par la voie basse température, nous arrivons à la même image physique d'un GdC avec des charges électriques multiples de 4 et sans charges magnétiques.

Calculs par matrice de transfert

L'application itérative de la matrice de transfert nous permet d'obtenir, dans la symétrie et les notations de la Sec. I.3.2.2, la ou les valeurs propres dominantes dans chaque secteur de symétrie W_x . On dénote par $\lambda_q^{W_x}$ la q -ième valeur propre dans le secteur W_x et par $f_q^{W_x} = \frac{1}{L} \ln(\lambda_q^{W_x})$ l'énergie libre équivalente par unité de longueur. Comme discuté précédemment, le secteur $W_x = 0$ est le plus grand et va donc correspondre à la plus grande valeur propre absolue. Le secteur $|W_x| = 1$ va décrire quant à lui le système avec deux monomères tests.

Les calculs de matrice de transfert sont parfaitement adaptés pour valider (de façon auto-consistante) les prédictions du GdC. Le GdC est en effet une théorie invariante conforme, et il est possible de s'appuyer sur les résultats célèbres des théories conformes [CARDY84, BLOTE86, AFFLECK86] pour interpréter les résultats (sur des échantillons de taille finie) obtenus par matrice de transfert. Dans un bref résumé, l'invariance conforme assure que :

$$\text{Éq. (9)} \quad f_1^0 = f(\infty) + \frac{\pi c}{6L^2} + o(L^{-4}),$$

avec $f(\infty)$ l'énergie libre dans la limite thermodynamique et c la *charge centrale* de la théorie conforme. La différence d'énergie libre entre les secteurs de symétrie avec ou sans monomères tests permet de déterminer la dimension d'échelle $X(0, 1)$ de l'opérateur monomère :

$$\text{Éq. (10)} \quad f_1^0 - f_1^1 = \frac{2\pi X(0, 1)}{L^2} + o(L^{-4}).$$

Enfin, la différence d'énergie libre dans le même secteur de symétrie $W_x = 0$ nous donne la dimension d'échelle de l'opérateur de dimère :

$$\text{Éq. (11)} \quad f_1^0 - f_2^0 = \frac{2\pi X(1, 0)}{L^2} + o(L^{-4}).$$

Tous les autres exposants plus élevés peuvent être et seront déterminés. Ces résultats forts de l'invariance conforme nous permettront d'obtenir simplement les exposants de décroissance des fonctions de corrélation désirées. Ces exposants seront déterminés de façon plus précise qu'avec les résultats Monte Carlo de la [Sec. II.3](#) où les effets de taille finie (et notamment l'influence des conditions aux bords) peuvent être importants. Les calculs matrice de transfert dont les résultats sont présentés par la suite ont été effectués par J. JACOBSEN.

- **Charge centrale**

La [Fig. 20a](#) montre la dépendance en température de la charge centrale c obtenue par un fit à trois points ([Éq. \(9\)](#) agrémentée de corrections en $1/L^4$). Un plateau émerge clairement à haute température avec la charge centrale tendant vers l'unité lorsque la taille des systèmes augmente. Une petite remontée est visible proche de la température critique, avant que la charge centrale ne s'effondre à basse température, signalant que le phase n'est plus critique. De façon phénoménologique, la température critique T_c peut être estimée par le maximum de la charge centrale pour les différents fits correspondant aux différentes tailles, et l'estimation obtenue est en bon accord avec l'estimation Monte Carlo.

- **Exposants fondamentaux**

En effectuant des fits à deux points basés sur les formules [Éq. \(10\)](#) et [Éq. \(11\)](#) (avec de nouveau une correction en $1/L^4$), nous obtenons une estimation de taille finie pour les exposants de décroissance α_d et α_m des fonctions de corrélation dimère-dimère et monomère-monomère. Les [Fig. 20b](#) et [Fig. 20c](#) présentent les estimations $\alpha_d(L-2, L)$ et $\alpha_m(L-2, L)$ en fonction de la température pour différentes tailles de systèmes. À température infinie, l'accord avec les résultats exacts $\alpha_d = 2$ et $\alpha_m = 1/2$ est excellent (non visible sur la figure). Dans la région critique $T \in [T_c, \infty]$, les données numériques s'extrapolent de façon correcte en loi de puissance vers la limite thermodynamique. Il en résulte une estimation de α_m qui croît lorsque la température diminue pour arriver à une valeur $\alpha_m(T_c) = 4$, alors que l'exposant α_d décroît de façon monotone jusqu'à $\alpha_d(T_c) = 1/4$. L'introduction de mono-

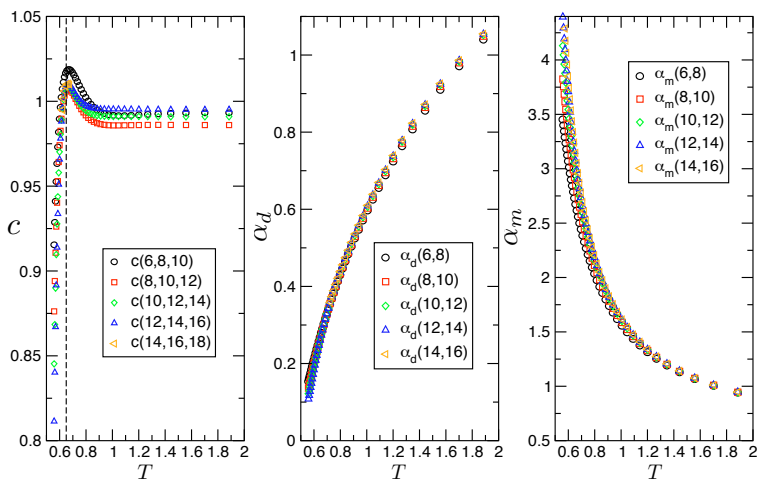


Fig. 20 En fonction de la température T : a) fits à trois points $c(L-4, L-2, L)$ pour la charge centrale. La ligne pointillée signale la température de transition T_c estimée par les simulations Monte Carlo. b) Fits à deux points $\alpha_d(L-2, L)$ pour l'exposant de dimère. (c) Fits à deux points $\alpha_m(L-2, L)$ pour l'exposant de monomère.

mères est donc pertinente dans toute la phase critique (puisque $X(0, 1) < 2$) et devient marginale à T_c , en accord avec le GdC. Une estimation de la température critique T_c peut être obtenue à partir du croisement des courbes pour différentes tailles de systèmes, comme dans le cas de la charge centrale. La valeur de T_c obtenue est en accord avec les estimations précédentes. Pour $T < T_c$, l'extrapolation vers la limite thermodynamique des exposants n'est pas possible (comme attendu pour une phase non critique).

La prédiction du GdC liée à l'existence d'une seule constante de couplage g se traduit en l'existence d'une courbe $\alpha_d \cdot \alpha_m = 1$ tout le long de la phase critique, indépendamment de la température T . Cette prédiction peut être vérifiée à partir des données présentées sur les Fig. 20b et Fig. 20c. Cette vérification sera présentée plus tard dans la Sec. III.2.5.

- **Exposants de dimères plus élevés**

La puissance prédictive et la pertinence du GdC peuvent être encore plus appréciées en considérant les exposants X plus élevés, obtenus à partir des valeurs propres sous-dominantes de la matrice de transfert. La Fig. 21 présente les 15 premiers exposants dans le secteur $W_x = 0$. Les deux premiers X_2 sont dégénérés (quasiment parfaitement même en taille finie) et correspondent à l'exposant de dimère α_d déjà évoqué. On retrouve aussi naturellement dans ce spectre l'opérateur identité et ses descendants de niveau 1 et 2 (avec des exposants constants $X = 1$ et $X = 2$), en accord avec les prédictions des théories conformes.

De façon plus spectaculaire, tous les autres exposants sont correctement décrits par l'expression $p^2 X_2 + q$, avec $p \geq 2$ et $q \geq 0$ entiers. Ceci se comprend parfaitement dans le GdC où ces exposants correspondent à des opérateurs de charge électrique p fois plus grandes que celle de l'opérateur de dimères, et à leurs descendants. Bien que les dégénérescences et égalités entre exposants ne sont jamais parfaites pour des échantillons de taille finie, il est remarquable de constater que l'accord est très bon. Ceci s'observe sur la Fig. 21 où les données pour X_2 (soit $p = 1$) représentées par la ligne solide ont été reportées pour construire $X_2 + 1$ et $4X_2$, ce qui permet de fitter quasi-parfaitement les exposants plus élevés obtenus numériquement.

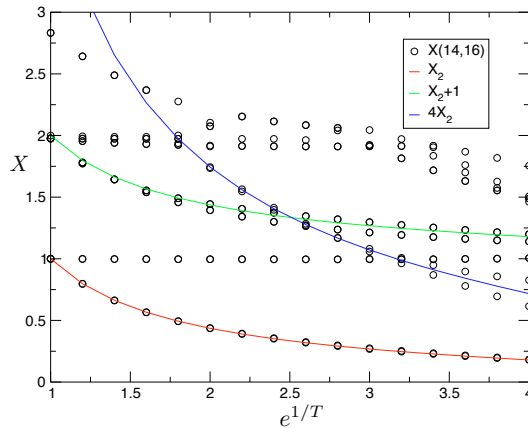


Fig. 21 Fits à deux points $X(L = 14, L = 16)$ pour les quinze premiers exposants dans le secteur de winding $W_x = 0$ en fonction du poids de Boltzmann $\exp(1/T)$. Tous les exposants mesurés sont simplement reliés à l'exposant fondamental de dimère $X_2 = \alpha_d/2$.

En résumé, les résultats de la Fig. 21 indiquent clairement que la description du modèle Éq. (2) en termes d'un GdC est correcte et complète.

Fluctuations du nombre de winding et constante de couplage du gaz de Coulomb

Nous dérivons ici une relation analytique entre la constante de couplage g du GdC dans la région haute température et les fluctuations du nombre de winding. On dénote par $P(W_x, W_y)$ la probabilité qu'une configuration de dimères ait le couple (W_x, W_y) de nombres de winding. À la lecture du premier terme de l'action effective Éq. (6), nous avons deviné que cette probabilité variait comme une gaussienne $P(W_x, W_y) \propto \exp(-g\pi(W_x^2 + W_y^2))$. Précisons cette relation. Dans la limite continue, $P(W_x, W_y)$ peut être calculée dans la phase haute température où les configurations de dimères sont correctement décrites par le champ libre [YANG87, DIFRANCESCO87] de hauteur. Microscopiquement, la hauteur est définie par sa variation lorsque l'on passe d'une plaquette à une autre, soit plus formellement dans le continu par l'intégrale de sa dérivée. Le nombre de winding le long d'un chemin fermé est précisément donné par cette intégrale sur ce chemin. La probabilité $P(W_x, W_y)$ est le rapport entre la fonction de partition Z_{W_x, W_y} restreinte aux champs de hauteurs ayant des nombres de winding donnés W_x, W_y le long de deux chemins traversant entièrement le tore formé par un système avec conditions aux bords périodiques, et la fonction de partition totale $\sum_{W_x, W_y \in \mathbb{Z}} Z_{W_x, W_y}$. Ce rapport est calculé de la façon suivante: séparons tout d'abord le champ de hauteur $h = h_{cl} + \delta h$ entre sa partie « classique » h_{cl} portant la « pente » et les nombres de winding W_x, W_y , et sa partie fluctuante δh . h_{cl} est solution des équations de mouvement $\Delta h_{cl} = 0$, et le terme croisé disparaît de la fonction de partition. La partie libre de l'Éq. (6) est donc la somme entre la partie classique et la partie fluctuante. Cette dernière ne dépend pas des nombres de winding et se factorise pour sortir de la probabilité $P(W_x, W_y)$.

Sur un réseau de taille $L_x \times L_y$ avec des conditions aux bords périodiques, les configurations du champ classique sont données par $h_{cl}(x, y) = x \frac{W_x}{L_x} + y \frac{W_y}{L_y}$, et la probabilité qui en résulte est :

$$P(W_x, W_y) = \frac{e^{-\pi g \left(\left(\frac{W_x}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{W_y}{L_y} \right)^2 \right) L_x L_y}}{\sum_{n, m \in \mathbb{Z}} e^{-\pi g \left(\left(\frac{n}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{m}{L_y} \right)^2 \right) L_x L_y}}.$$

Les fluctuations du nombre de winding dans la direction x sont alors données par :

$$\langle W_x^2 \rangle = \frac{\sum_{n \in \mathbb{Z}} n^2 e^{-\pi g n^2 (L_y / L_x)}}{\sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-\pi g n^2 (L_y / L_x)}}. \quad \text{Éq. (12)}$$

Les propriétés à courte distance ne sont pas bien sûr décrites par un champ libre. Les propriétés topologiques des nombres de winding (*i.e.* aucun mouvement local ne peut les changer) nous emmènent à penser que les fluctuations locales dues au réseau ne peuvent modifier l'Éq. (12).

Cette relation est particulièrement utile numériquement car les fluctuations du nombre de winding sont facilement accessibles en Monte Carlo. Elle permet un calcul indépendant de la constante de couplage g en fonction de la température qui peut être comparé aux résultats obtenus par les calculs de matrice de transfert. Les résultats obtenus pour $g(T)$ sont

présentés dans la Fig. 22 avec ceux obtenus par matrice de transfert de la Sec. III.2.4, et les trois courbes sont essentiellement identiques. La valeur de g à T_c (dénotée par la ligne pointillée dans la figure) est $g_c = g(T_c) = 4.0(2)$, en accord avec la prédiction $g_c = 4$ du CdG. Ces résultats valident donc entièrement à la fois l'analyse en termes d'un GdC ainsi que les calculs champs libres qui ont permis de dériver l'Éq. (12). En particulier, nous observons sur la Fig. 22 que les exposants de dimère et monomères vérifient bien la relation prédite $\alpha_m = 1/\alpha_d$.

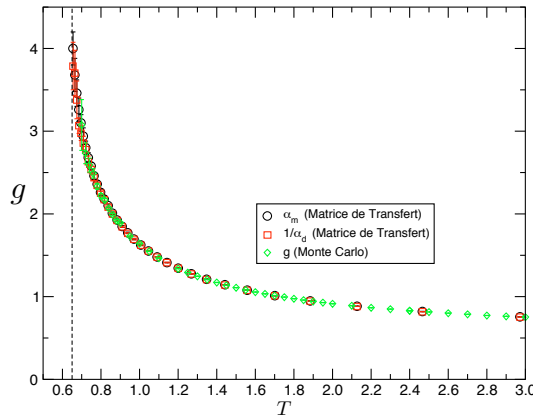


Fig. 22 Constante de couplage du gaz de Coulomb g en fonction de la température T , obtenue par la matrice de transfert (à travers les exposants $\alpha_d = 1/g$ et $\alpha_m = g$ - voir Sec. III.2.4.1) et par simulations Monte Carlo (grâce à l'Éq. (12)).

La relation analytique Éq. (12) a été dérivée pour un champ libre dans le continu par V. PASQUIER dans le cas général. Elle a été retrouvée rigoureusement pour le cas du modèle de dimères sans interaction par BOUTILLIER et DE TILLÈRE en utilisant la formulation en termes de Pfaffiens [BOUTILLIER09]. On peut la retrouver sous une autre forme dans un travail de PROKOF'EV et SVISTUNOV sur les différentes définitions de la densité superfluide pour un fluide bosonique [PROKOF'EV00]. À noter que cette relation est assez générale et peut être utilisée numériquement pour d'autres gaz de Coulomb [BALABANYAN07]. Cette relation est l'équivalent dans le cas bidimensionnel de la relation de POLLOCK et CEPERLEY (discutée plus loin dans la Sec. V.2.1.1) reliant la densité superfluide au nombre de winding des *worldlines* dans des systèmes bosoniques [POLLOCK87]. La différence essentielle est que les fluctuations du nombre de winding sont *discrètes* en deux dimensions, contrairement au cas tridimensionnel - et l'on ne peut pas passer de la somme à l'intégrale (cette remarque est aussi au coeur de l'argument développé dans la Réf. [PROKOF'EV00]). Cela est toutefois possible pour des systèmes peu rigides (lorsque $g \rightarrow 0$), on a alors $\langle W^2 \rangle = 1/(2\pi g)$. Pour $g = 4$, l'Éq. (12) prédit un saut de $\langle W^2 \rangle$ ridiculement faible à la transition, de l'ordre de $7 \cdot 10^{-6}$! Ceci explique pourquoi l'incertitude sur $g(T_c)$ est assez grande, malgré la qualité des simulations MC.

Cumulants de Binder dans la phase haute température et à la transition

L'analyse par GdC de la phase haute température permet d'expliquer (en partie) le comportement en taille finie des cumulants de Binder pour le paramètre d'ordre de rotation

brisée B_D et celui associé au paramètre d'ordre colonnaire B_{col} (Fig. 15a et Fig. 15c). En principe, pour une phase critique, on s'attend à ce que toutes les courbes des cumulants de Binder pour des systèmes de différentes tailles soient confondues. Donnons un argument physique pour aller plus loin⁸ : pour observer ce comportement, il faut que les valeurs moyennes contenues dans le cumulant de Binder contiennent l'information de la criticalité (et le fait que le système soit de taille finie) : ainsi le terme du dénominateur $\langle \mathcal{O}^2 \rangle$ (ainsi que les puissances supérieures) « ne saura pas » que le système est critique si le corrélateur associé $\langle \mathcal{O}(0)\mathcal{O}(r) \rangle$ décroît trop rapidement (tel que son intégrale converge). On s'attendra donc à une coïncidence des courbes de Binder pour différentes tailles si la dimension d'échelle de \mathcal{O} est *inférieure* à l'unité. Comme indiqué précédemment, PAPANIKOLAOU *et al.* [PAPANIKOLAOU07] ont dérivé la dimension d'échelle du paramètre d'ordre colonnaire Ψ_{col} qui vaut $1/(2g)$, et celle du paramètre d'ordre de rotation brisée D qui vaut $2/g$. Cet argument prédit donc des courbes de cumulant de Binder colonnaire superposées pour $g \geq 1/2$ (ce qui est toujours le cas dans la gamme de température $T \geq T_c$), et une superposition des courbes de cumulant de Binder B_D uniquement lorsque $2 \leq g(T) \leq g(T_c) = 4$, soit dans une gamme de température réduite $T_c \leq T \lesssim 0.85$ (voir Fig. 22). Cette prédiction explique parfaitement le comportement haute température du cumulant de Binder B_{col} (Fig. 15c) avec des courbes confondues pour différents L , ainsi que celui de B_D (non visible dans la Fig. 15a) avec des courbes bien séparées à haute température.

Par contre, on ne peut pas simplement expliquer le comportement anormal de B_{col} proche de T_c (encart droit de la Fig. 15c), et plus problématiquement le croisement des courbes de B_D à T_c (on s'attendrait à ce que les courbes soient confondues jusqu'à T_c). La Réf. [PAPANIKOLAOU07] effectue la même remarque tout en confirmant avec des simulations indépendantes ce croisement. Celui-ci doit donc être attribué à des effets sous-dominants (des corrections à la dimension d'échelle) que nous n'avons pas pu caractériser plus précisément. *A posteriori*, il n'était donc pas évident que ce croisement existe, bien que celui-ci s'avère en pratique l'une des meilleures façons de déterminer T_c .

III.3. Discussion

Justification rigoureuse du gaz de Coulomb dans la phase haute température

Les résultats pour le modèle Éq. (2) ont attiré l'attention de physiciens mathématiciens, qui ont récemment justifié rigoureusement [FALCO13, GIULANI14, GIULANI15] la description en termes d'un gaz de Coulomb (avec exposants flottants) de la phase haute température, pour la première fois donnée dans les Réfs. [ALET05, ALET06B] (voir aussi Réf. [PAPANIKOLAOU07]). En quelques mots, les Réfs. [GIULANI14, GIULANI15] réécrivent le modèle de dimères en interaction comme une intégrale non gaussienne sur des variables de Grassman [HAYN94], qu'ils traitent perturbativement par des méthodes de groupe de renormalisation constructif et des techniques d'holomorphie discrètes [GIULANI14, GIULANI15]. Ces auteurs peuvent ainsi justifier du caractère champ libre dans la phase haute température, en donnant en perturbation une estimation de la constante de gaz de Coulomb qui varie comme [FALCO13, GIULANI15] $g(T) = g(T = \infty) - \lambda v/T$ avec $\lambda > 0$.

Connection avec d'autres modèles de physique statistique classique

L'interprétation en termes d'un GdC du modèle Éq. (2) le relie tout naturellement à la

⁸ Je remercie K. DAMLE pour m'avoir donné cet argument.

grande famille des modèles présentant un comportement de GdC avec champ scalaire [NIENHUIS87]. Bien que non soluble exactement, sa définition le place parmi les modèles les plus simples et naturels, à côté du modèle XY ou du modèle à 6 vertex. De plus, il peut être facilement étendu (en changeant le signe des interactions, en choisissant d'autres géométries etc), ce qui permet de tester plusieurs caractéristiques d'un GdC. Nous suivrons en partie cette démarche dans le [Chapitre IV](#).

Ce modèle admet aussi une description en termes de hauteur (détaillée dans la [Sec. III.1](#)), ce qui le relie à une grande variété de modèles de spins ou de modèles « *solid-on-solid* » (voir les Réfs. [KONDEV95, KONDEV96, RAGHAVAN97, ZENG97] et les références incluses) possédant le même comportement physique. En plus de sa simplicité, le modèle de dimères étudié présente deux avantages certains. Le premier est qu'il existe deux points dans son diagramme de phase (à températures nulle et infinie) où le modèle est exactement soluble. Le second point (probablement le plus important) est qu'il est possible d'en effectuer des simulations numériques *très* efficaces sur des échantillons de grande taille. Ceci est dû à l'existence d'algorithmes Monte Carlo perfectionnés [SANDVIK06, PAPANIKOLAOU07], mais aussi à une taille relativement clémente de l'espace des configurations pour la matrice de transfert.

Du point de vue strict de la simulation numérique de ce type de modèles, nos études montrent que l'utilisation de la description en hauteur du modèle n'est pas nécessaire pour obtenir des résultats numériques performants, contrairement à la Réf. [RAGHAVAN97]. Cette représentation est préférentiellement utilisée dans les travaux de HENLEY et collaborateurs [KONDEV95, KONDEV96, RAGHAVAN97, ZENG97] pour calculer la constante de couplage du CdG, à travers les fluctuations de grande longueur d'onde de la hauteur. À travers l'Éq. (12) et le calcul des fluctuations du nombre de winding, nous avons obtenu une méthode alternative pour déterminer g , et ceci sans effectuer de fit numérique.

Au sujet de la physique des dimères classiques, l'analyse théorique que nous présentons peut être facilement étendue pour comprendre les résultats obtenus sur des modèles (sans interaction) de dimères à longue portée [SANDVIK06]. Lorsque les dimères sont permis (aussi infinitésimalement que ce soit) entre sites seconds voisins sur le réseau carré, sa nature bipartite est perdue et la description en termes de hauteur n'est plus valide : les corrélations deviennent exponentielles. Cette règle d'or que nous avons déjà énoncée dans le [Chapitre I](#) n'est valide en fait que pour des pavages de dimères sans interaction. Nos résultats indiquent que la donne peut être changée en présence d'interactions entre les dimères, comme en attestera un exemple dans le [Chapitre IV](#). Si par contre on autorise les dimères entre quatrièmes voisins comme le fait aussi la Réf. [SANDVIK06], le réseau reste bipartite et le système critique. En particulier, la Réf. [SANDVIK06] trouve que l'exposant de la fonction de corrélation entre monomères varie continûment (de $\alpha_m = 1/2$ à $\alpha_m = 1/9$) avec la fraction de dimères quatrièmes voisins introduite dans le système. Ce résultat est simplement compris avec notre analyse en considérant que la constante de couplage du CdG varie continûment avec cette fraction, résultant en un exposant α_m variable. Un autre aspect des résultats de la Réf. [SANDVIK06] semble plus difficile à interpréter de premier abord avec notre analyse : l'exposant de dimères reste quant à lui fixé à $\alpha_d = 2$. En fait, il suffit de constater [SANDVIK06] qu'il existe une contribution supplémentaire (dite « dipolaire ») à la fonction de corrélation dimère-dimère, qui reste fixée en $1/r^2$ (quelle que soit la fraction de dimères quatrièmes voisins introduite). Cette partie correspond bien sûr aux termes en gradient dans l'Éq. (8). La contribution de « vertex » [FRADKIN04] expliquée par le GdC va quant à elle bien posséder un exposant variant continûment avec cette fraction (de 2 à 9). Le compor-

tement qui domine la fonction de corrélation à grande distance est celui de la contribution ayant le plus petit exposant : c'est ici la contribution dipolaire en $1/r^2$. Ceci est tout à fait analogue aux corrélations dans la chaîne de spins quantiques anisotrope XXZ [LUTHER75], qui est aussi un modèle possédant une description en GdC. Dans ce cas, la partie uniforme de la fonction de corrélation $\langle S^z(0)S^z(r) \rangle$ varie en $1/r^2$, alors que la partie alternée varie comme $r^{-f(\Delta)}$ où f est une fonction du paramètre d'anisotropie Δ de la chaîne. À noter que dans le modèle de dimères, il est possible d'annuler la contribution dipolaire en choisissant convenablement l'orientation respective des dimères dans la fonction de corrélation, ainsi que le vecteur position les séparant : on se retrouve alors avec la seule contribution de vertex.

Finalement, rappelons que le modèle de dimères en interaction Éq. (2) avait été introduit originellement dans le contexte des cristaux liquides. Par un développement basse température, POLAND et SWAMINATHAN [POLAND79] avaient donné une estimation de la température critique égale à $T_c = 0.61(1)$, assez proche de la véritable valeur. Toutefois, ces auteurs avaient conclu de façon incorrecte sur la nature de la transition de phase (annoncée comme étant de type Ising) ainsi que sur celle de la phase haute température (non reconnue comme critique).

Propriétés à température finie du modèle de dimères quantiques

Finissons cette discussion en spéculant sur le diagramme de phase à température finie du modèle de dimères quantiques sur le réseau carré. Le modèle de dimères classiques Éq. (2) offre naturellement des informations sur le comportement du modèle de dimères quantiques [ROKHSAR88] à haute température, où les effets quantiques ne sont pas dominants. En particulier, la phase critique trouvée dans le modèle classique devrait aussi être présente à haute température dans le diagramme de phase du modèle de dimères quantiques : nous avons vu en effet que la nature rugueuse de cette phase était intimement liée à la nature compacte du pavage de dimères, et non pas aux détails exacts des fluctuations (thermiques ou quantiques).

Conjointement, la fonte à température finie de la phase colonnaire (ainsi que probablement celle de la phase plaquette) se fera certainement à travers une transition KT comme dans le modèle classique. Ces prédictions sont en opposition avec le diagramme de phase à température finie du modèle de dimères quantiques spéculé par LEUNG *et al.* [LEUNG96], qui prédisaient que le cristal colonnaire se détruirait en deux étapes (avec une phase plaquette intermédiaire), et ceci même dans la limite classique. Nous avons démontré que cela n'était pas le cas.

Le diagramme de phase à température nulle du modèle de dimères quantiques sur le réseau carré Éq. (1) est habituellement présenté de la façon suivante [LEUNG96, SYLJUASEN05, SYLJUASEN06] : pour des grandes valeurs de $v/t < 0$, le système se situe dans la phase colonnaire. Lorsque v/t augmente, le fondamental subit une transition de phase quantique vers une phase plaquette, à une valeur assez incertaine de v/t (voir discussion plus bas). La phase plaquette (éventuelle, voir plus bas) se finit au point multicritique Rokhsar-Kivelson $v = t$ [ROKHSAR88], où la fonction de corrélation dimère-dimère décroît en loi de puissance. Finalement, pour $v/t > 1$, le système se situe dans la phase alternée. Ces connaissances récapitulées, nous sommes maintenant bien placés pour y connecter les résultats à température finie pour le modèle classique ($t = 0$) et tracer ainsi Fig. 23 le diagramme de phase schématique proposé pour le modèle de dimères quantiques dans le plan $(v/t, T/|v|)$.

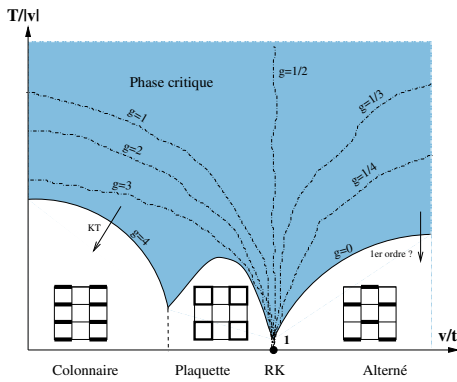


Fig. 23 Diagramme de phase schématisé à température finie du modèle de dimères quantiques sur le réseau carré. Les différents cristaux (colonnaire, plaquette ou alterné) fondent tous en laissant place à une phase haute température critique, possédant des corrélations en loi de puissance caractérisée par la constante de couplage g d'un gaz de Coulomb. À noter que l'existence de la phase plaquette est remise en cause par les simulations les plus récentes du modèle quantique [BANERJEE14, SCHWANDT16].

La phase critique présente dans toute la phase haute température va s'étendre probablement jusqu'au point RK. Cette phase critique peut être paramétrisée par la constante de couplage du gaz de Coulomb g , et sur la Fig. 23 sont représentées les lignes « d'iso- g ». La ligne $g = 4$ dénote la séparation entre la phase haute température et la phase colonnaire (et probablement avec la phase plaquette aussi), correspondant ainsi à la transition KT. Si elle existe, la transition entre la phase plaquette et la phase colonnaire est très certainement du premier ordre à $T = 0$ [FOUET03] et on peut donc s'attendre à ce que cette transition subsiste à température finie.

De l'autre côté du diagramme de phase, la phase rugueuse va donner lieu à la phase alternée à basse température à travers l'annulation de la constante de couplage du GdC $g \rightarrow 0$. Nous évoquerons plus en détail cette transition dans le Chapitre IV. Finalement, il est possible de conjecturer (Fig. 23) que toutes les lignes d'iso- g se rejoignent au point RK ($T = 0, v/t = 1$),

et ceci est consistant avec la nature multi-critique de ce point [FRADKIN04]. Il est difficile de vérifier cette prédiction étant donné qu'il n'existe actuellement pas d'algorithme efficace pour étudier le modèle de dimères quantiques à température finie.

Finalement, discutons de l'existence de la phase plaquette. Remarquons premièrement que le modèle classique permet de simuler des échantillons de très grande taille, ce qui n'est pas le cas du modèle de dimères quantiques. Les simulations numériques de ce modèle sont en effet difficiles : la diagonalisation exacte est limitée à des systèmes de petite taille (au mieux des réseaux 10^2) et bien qu'il n'y ait pas de problème de signe, les simulations Monte Carlo Quantique sont aussi limitées (principalement à cause de la contrainte globale sur les pavages de dimères). Des progrès ont toutefois été effectués dans la formulation « Fonction de Green » [SYLJUASEN05, RALKO05, RALKO06], et il est possible de simuler le fondamental de systèmes jusqu'à des tailles 32^2 avec cette technique. Cette limitation dans les tailles de système pourrait avoir des conséquences importantes pour l'existence de la phase plaquette : en effet, nous avons vu que les corrélations plaquettes étaient importantes dans le cas classique et rendaient difficile l'analyse de taille finie, pour des systèmes aussi grands que 160^2 . Nous pouvons prendre cette remarque comme une indication que la phase plaquette pourrait tout aussi bien disparaître dans la limite thermodynamique du diagramme de phase du modèle de dimères quantiques. Cette remarque n'est pas si innocente car le point critique séparant la phase colonnaire de la phase plaquette (hypothétique) a d'abord été estimé [LEUNG96] autour de $v/t \sim -0.2$, puis autour de $v/t = 0.60(5)$ sur des échantillons de plus grande taille [SYLJUASEN05, SYLJUASEN06] : l'extension de la phase plaquette diminue donc avec la taille des systèmes simulés. Un scénario intermédiaire [RALKO08] propose aussi que la phase plaquette soit remplacée par une phase mixte contenant à la fois des corrélations

plaquettes et colonnaires. Les dernières simulations utilisant une autre famille d'algorithmes Monte Carlo quantique [BANERJEE14, SCHWANDT16] indiquent même que la phase colonnaire subsiste jusqu'au point RK, avec à son approche des fluctuations fortes créant un régime apparaissant comme « quasi-U(1) » critique en taille finie.

Chapitre IV. Autres résultats sur les modèles bidimensionnels

Ce chapitre présente des résultats obtenus sur des extensions et variantes du modèle de dimères classiques sur le réseau carré présenté et résolu dans les chapitres précédents. Tous ces modèles de dimères prennent place sur des réseaux bidimensionnels. Bien que chacune des extensions nécessite une analyse complémentaire, le formalisme et les résultats introduits précédemment sont suffisants pour comprendre au moins qualitativement la physique de ces modèles. Nous ne donnons donc ici que les ingrédients essentiels et les résultats les plus importants propres à chaque étude. Le lecteur intéressé consultera les publications attenantes pour plus de détails.

IV.1. Réseau hexagonal et expériences d'adsorption

Considérons le même type de modèle sur le réseau hexagonal. Il y a plusieurs façons d'imaginer des interactions entre dimères proches sur ce réseau. On pourrait imaginer que deux dimères subissent des interactions répulsives s'ils sont parallèles sur un même hexagone (sur les côtés opposés), ou bien des interactions attractives à trois dimères s'ils résident tous les trois sur un même hexagone, ou encore des interactions répulsives pour des dimères parallèles sur des hexagones voisins. Ces trois types d'interaction conduisent à une phase cristalline à basse température, où les dimères s'arrangent tous par trois dans un hexagone (un hexagone sur trois étant vide). Le fondamental est dégénéré trois fois, et on s'attend à exactement la même physique que dans le cas du réseau carré. La seule différence entre les trois modèles résidera dans la forme exacte de la fonction $g(T)$ qui dépend des détails microscopiques.

La motivation pour étudier ce modèle est cette fois-ci directement expérimentale, puisqu'elle concerne les expériences [BLUNT08] sur les molécules organiques adsorbées sur le graphite. L'analyse des données STM indique en effet que la distribution des pavages n'est pas uniforme et qu'en particulier les corrélations hauteur-hauteur ne répondent pas au résultat attendu pour des pavages libres. Cela suggère que certains arrangements locaux sont préférés parmi d'autres, et en particulier les données expérimentales [BLUNT08] suggèrent que les dimères parallèles entre hexagones voisins sont moins fréquents (troisième modèle cité plus haut). L'analyse théorique [JACOBSEN09] de ce modèle est essentiellement identique à celle du cas carré (en posant simplement $p = 3$ puisque le fondamental est dégénéré trois fois), et les simulations numériques (par Monte Carlo et matrice de transfert) permettent de déterminer la courbe $g(T)$. Celle-ci permet de calibrer l'échelle d'énergie expérimentale en comparant la température nécessaire à l'obtention de la constante g déterminée expérimentalement. La connaissance numérique de $g(T)$ permet alors de prédire la transition Kosterlitz-Thouless à une température de $T = 110K$ pour ce composé. Malheureusement, le solvant utilisé dans ces expériences gèle à cette température et il faudrait recourir à des mesures dans le vide (techniquement plus complexes) qui n'ont pas été effectuées sur ce composé à notre connaissance.

En revanche, la Réf. [STANNARD12] propose une autre possibilité d'étudier le diagramme de phase en changeant le type de molécule organique, le solvant et dans un cas la température. Six combinaisons expérimentales différentes sont proposées, correspondant à des rapports T/v effectifs différents [STANNARD12]. Aucun composé n'est dans la phase colonnaire, mais

cinq se situent à différents points de la phase critique, alors qu'un dernier se trouve dans la phase alternée à $v < 0$ (voir Sec. IV.4).

IV.2. Réseau carré avec interactions anisotropes

Le modèle de l'Éq. (2) a été généralisé par H. OTSUKA dans la Réf. [OTSUKA09] au cas d'interactions anisotropes :

$$E_c = v_h N^c \left(\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \right) + v_v N^c \left(\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \right) \quad \text{Éq. (13)}$$

où v_h (v_v) est l'énergie d'une plaquette ayant deux dimères parallèles horizontaux (verticaux). Dans le cas d'interactions attractives $v_h, v_v < 0$, on obtient à basse température une phase colonnaire avec une symétrie réduite dans le cas $v_h \neq v_v$. Si $v_h > v_v$ ($v_h < v_v$), deux fondamentaux avec orientation horizontale (verticale) sont sélectionnés parmi ceux de la Fig. 7. L'analyse du Chapitre III tient entièrement avec cette fois-ci $p = 2$ générant une transition KT pour $g = 1$.

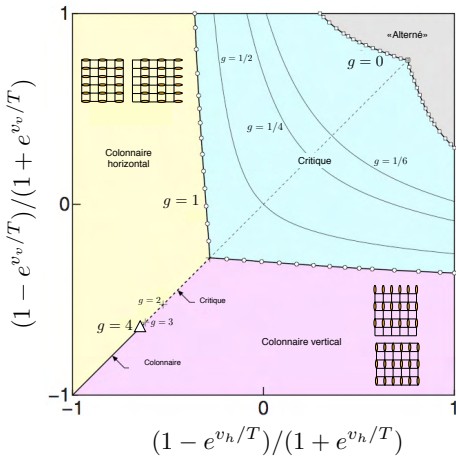


Fig. 24 Diagramme de phase du modèle anisotrope Éq. (13) (adapté de la Réf. [OTSUKA09]).

Le diagramme de phase obtenu par OTSUKA (par méthode de matrice de transfert et à l'aide d'une analyse poussée par croisement de niveau) est reproduit dans la Fig. 24. On distingue clairement la phase critique avec des lignes « d'iso- g », séparée par une transition KT à $g = 1$ des phases colonnaires horizontale et verticale. Le système reste critique entre ces deux phases le long de la ligne $v_h = v_v$, avec une transition du second ordre (avec des exposants variant continûment) séparant les deux phases. Au delà du point $g = 4$ (signalé par un triangle) qui correspond à la transition KT du modèle Éq. (2), la transition devient du premier ordre. Finalement pour $v_h, v_v > 0$ (répulsion entre dimères), la phase critique disparaît au profit d'une phase de type alternée. Ce cas est discuté en détail dans la Sec. IV.4.

Finalement, et bien qu'il ne s'agisse pas d'interactions anisotropes à strictement parler, signalons que la Réf. [Li14] retrouve, par des méthodes réseau de tenseurs (Sec. I.3.2.3) la même transition que le modèle originel Éq. (2) lorsque seule une plaquette sur deux (dans un réseau « damier ») est dotée d'interactions répulsives.

IV.3. Dopage en monomères du modèle sur le réseau carré

Introduisons un nombre fini de monomères dans le modèle Éq. (2), soit de façon canonique avec une densité finie de monomères, soit grand-canonique avec une fugacité ξ par monomère. Raisonnons tout d'abord à faible dopage : le GdC indique que dans la phase critique l'opérateur introduction de monomères est pertinent. Par conséquent, on s'attend à ce que toute fugacité $\xi \neq 0$ détruise la phase critique pour donner place à une phase liquide

normale. Au point critique, l'opérateur est marginal et on s'attend par contre à ce qu'une nouvelle ligne critique (transition du second ordre) émerge de ce point dès qu'on introduit une fugacité non nulle. D'un autre coté, le système peut toujours s'ordonner de façon colonnaire à basse température. Un simple raisonnement énergétique à température nulle indique qu'il doit y avoir une transition de phase quantique du premier ordre (croisement de niveau) entre une phase colonnaire à faible dopage et une phase liquide à fort dopage.

Étant donnée l'existence d'une transition du second ordre à faible dopage et du premier ordre à fort dopage, il doit donc exister un point tricritique dans le plan (T, ξ) . Des calculs matrice de transfert [ALET06B] effectués par J. JACOBSEN confirment entièrement cette analyse et situent le point tricritique à $(T^* = 0.29(2), \xi^* \sim 4.1)$. Ces calculs ont aussi montré que les exposants critiques variaient continûment le long de la ligne du second ordre qui émane de T_c . Les valeurs des exposants obtenus numériquement indiquent que le modèle avec monomères se situait dans la même classe d'universalité que le modèle d'Ashkin-Teller ou le modèle de Potts à $q = 4$ états sur le réseau carré dilué [CARDY80, NIENHUIS82]. Le point tricritique est d'ailleurs dans la classe d'universalité du modèle de Potts critique à $q = 4$ états. Cette analyse a été confirmée dans la Réf. [PAPANIKOLAOU07] par une analyse plus poussée de théorie des champs. Le diagramme de phase finalement obtenu [ALET06B] en présence de monomères est représenté dans la Fig. 25.

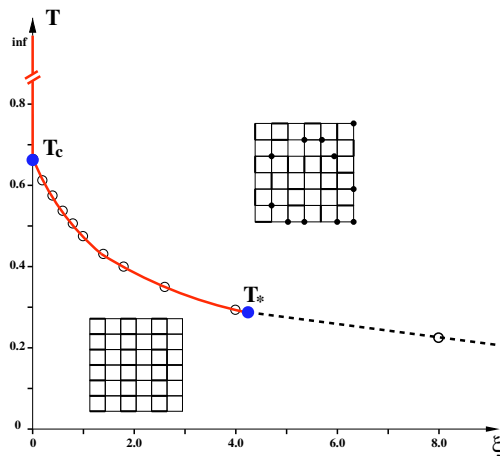


Fig. 25 Diagramme de phase température T -fugacité ξ pour le modèle de dimères en interaction dopé en monomères. À haute température ou forte fugacité, le système est dans une phase liquide normale alors qu'il s'ordonne de façon colonnaire dans l'autre limite. Les lignes solides indiquent des transitions du second ordre avec des exposants variant continûment, la ligne pointillée une transition du premier ordre et le cercle à $T^* = 0.29(2)$ un point multicritique.

À noter qu'un diagramme de phase qualitativement similaire a aussi été obtenu par OTSUKA [OTSUKA11] dans le cas du réseau hexagonal dopé en monomères : on trouve bien une ligne critique partant du point de transition KT du modèle non dopé [JACOBSEN09] qui se finit en un point tricritique la séparant d'une ligne de transition du premier ordre. Une différence notable est que la ligne critique est dans une classe d'universalité différente, celle du modèle de Potts à $q = 3$ possédant une charge centrale $c = 4/5$ (différent de la ligne critique $c = 1$ obtenue pour le réseau carré). Le point tricritique est lui aussi différent, et correspond à

un nouveau point fixe avec une charge centrale $c = 6/7$. Encore une fois, ces résultats peuvent se comprendre à l'aune du modèle de Potts à $q = 3$ états sur le réseau carré dilué [NIENHUIS82], qui possède les mêmes points fixes : les dimères jouent le rôle des variables de Potts, alors que les monomères diluent le réseau [OTSUKA11].

IV.4. Interactions répulsives sur le réseau carré

Que se passe-t-il si l'on change le signe des interactions entre dimères, c.-à-d. en prenant $v = 1$ dans l'Éq. (2) ? Ces interactions répulsives favorisent les plaquettes avec un seul dimère (plaquettes non flippables). Il est facile de construire des états n'ayant aucune plaquette flippable : ce sont les états alternés de la Fig. 19, qui sont forcément fondamentaux lorsque $v = 1$. À la différence du cas précédent, ce ne sont toutefois pas les seuls états fondamentaux. En « poussant » les dimères le long d'une ligne diagonale à l'axe des dimères tel que représenté dans la Fig. 26, il est possible de créer une autre configuration sans plaquette flippable. La création de cette ligne de défaut sans coût énergétique va changer le nombre de winding de $(0, \pm L/2)$ (ou $(\pm L/2, 0)$) dans une configuration alternée « pure » vers une valeur $(\mp 1, \pm L/2 - 1)$ (ou $(\pm L/2 - 1, \mp 1)$) pour la configuration avec défaut. On peut répéter cette opération plusieurs fois à des endroits différents et on s'aperçoit que le fondamental a une dégénérescence infinie à la limite thermodynamique, et qui croît « semi-extensivement » comme $\exp(\alpha L)$.

Cette grande dégénérescence du fondamental pose plusieurs difficultés. Premièrement, la

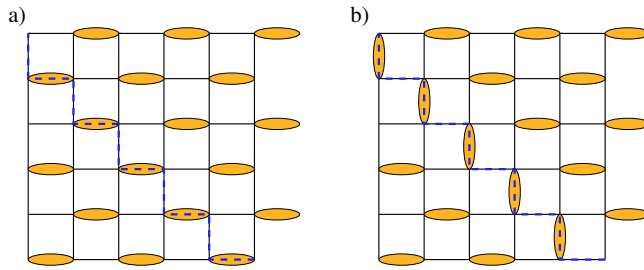


Fig. 26 En bougeant les dimères le long d'une ligne diagonale (pointillée) sur une configuration alternée « pure », on obtient une configuration avec une ligne de défauts également sans plaquette flippable.

définition d'un paramètre d'ordre alterné écrit dans le même esprit que la paramètre d'ordre colonnaire Éq. (3) n'est pas correcte, puisqu'il ne serait pas maximal pour les configurations avec des lignes de défauts. Il est possible de remédier à ce problème en remarquant que la somme des deux nombres de winding $|W_x| + |W_y|$ est maximale (égale à $L/2$) dans tous les fondamentaux, ce qui permet de définir un paramètre d'ordre. Toutefois, il n'est pas simple d'associer une symétrie brisée à ce paramètre d'ordre. Un autre problème vient du ralentissement et de l'inefficacité des simulations numériques à basse température, dus aux barrières entropiques séparant les différents fondamentaux. Il faut en effet effectuer un grand nombre de mouvements locaux de dimères pour passer d'un fondamental à un autre. Cela résulte en une perte d'ergodicité claire dans les simulations Monte Carlo, même en utilisant les algorithmes sophistiqués présentés dans le Chapitre I.

Diminuant la température à partir du cas sans interaction, on s'attend à ce que l'action effective Éq. (6) soit encore valide mais que g diminue avec T , puisque les configurations alternées ont un grand nombre de winding. C'est en effet ce qui est observé numériquement sur la Fig. 27a. On obtient donc un scénario où l'action Éq. (6) n'est plus valide à basse température non plus car le terme de potentiel d'accrochage devient pertinent, mais parce que $g \rightarrow 0$ et annule le premier terme. Il faut alors en principe aller chercher les termes suivants en $|\nabla h(\mathbf{r})|^4 + \dots$ pour décrire une éventuelle transition.

Le calcul de g semble donner une estimation de la température critique autour de $T_c \sim 0.45$ (voir Fig. 27a). Les courbes du cumulante de Binder du « paramètre d'ordre » $|W_x| + |W_y|$ pour différentes tailles de systèmes ne se croisent pas en un point unique à basse température, comme cela est visible sur la Fig. 27b. Ceci est typique d'une transition du premier ordre. Une estimation grossière de T_c est toutefois possible, et est compatible avec $T_c \sim 0.45$.

En ce qui concerne la thermodynamique, de fortes fluctuations statistiques résultent en des irrégularités fortes dans la chaleur spécifique pour des systèmes de grande taille (Fig. 28a). La chaleur spécifique ne semble pas diverger avec le volume du système comme cela devrait être le cas pour une transition du premier ordre. Le cumulante de l'énergie (Fig. 28b) a quant à lui un comportement singulier proche d'une température $T \sim 0.5$: une chute dramatique vers des valeurs fortement négatives depuis sa valeur $2/3$ à haute température. Ceci n'est typique à notre connaissance ni d'une transition du premier ordre ni d'une du second ordre.

Ces résultats se comprennent parfaitement à l'aide de la remarque judicieuse d'OTSUKA [OTSUKA09] : le point de transition où g s'annule est équivalent au point ferromagnétique $\Delta = -1$ de la chaîne de spins XXZ, qui sépare la phase critique de la phase ferromagnétique à $\Delta < -1$. À ce point, une symétrie étendue apparaît (la symétrie SU(2) dans le modèle de spins quantiques), et une dégénérescence plus grande apparaît (celle en S_z pour le modèle de spins quantiques, celle liée à $|W_x| + |W_y| = L/2$ pour le modèle de dimères). En

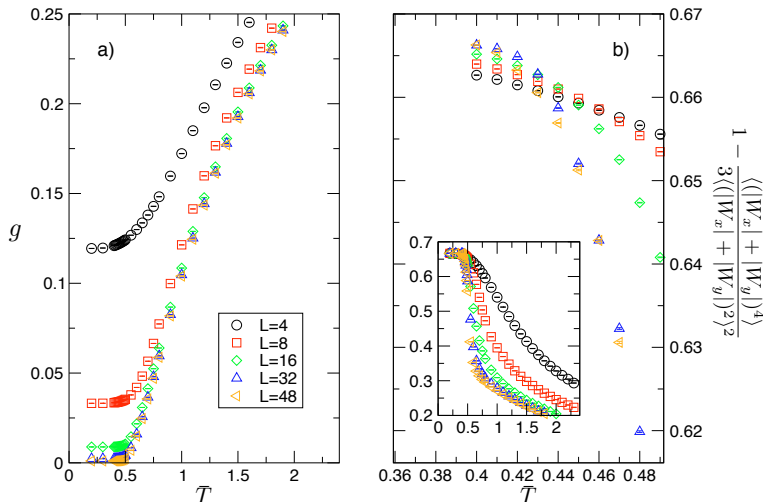


Fig. 27 En fonction de la température, pour différentes tailles de système et $v = 1$: a) Constante de couplage du Gaz de Coulomb g . b) Cumulant de Binder du « paramètre d'ordre » $1 - \langle (|W_x| + |W_y|)^4 \rangle / (3(\langle |W_x| + |W_y| \rangle)^2)$ proche de la température $T \sim 0.5$. Encart : Cumulant de Binder dans une gamme plus large de température.

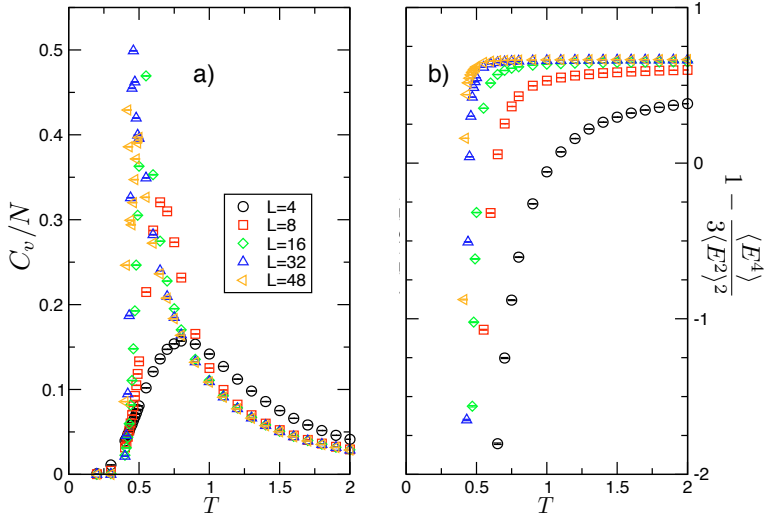


Fig. 28 En fonction de la température, pour différentes tailles de systèmes et $v = 1$: a) Chaleur spécifique par site. b) Cumulant de Binder de l'énergie $1 - \langle E^4 \rangle / (3 \langle E^2 \rangle^2)$.

particulier, l'énergie libre du modèle de dimères est indépendante du secteur de winding (ce qu'on devine puisque $g = 0$ et que les secteurs à haut winding ne sont plus pénalisés) : tous les secteurs sont équiprobables à la transition. Cette correspondance peut se faire plus formellement à l'aide de la théorie des champs [OTSUKA09, PAPANIKOLAOU07] dont les prédictions ont été vérifiées par calculs de matrice de transfert [OTSUKA09]. L'analyse fine par croisement de niveau de la Réf. [OTSUKA09] donne une transition à $T_c = 0.51$ dans le cas du modèle de l'Éq. (2), et permet de tracer la ligne de transition de phase pour le modèle anisotrope Éq. (13) (symboles carrés sur la Fig. 24).

Formellement, le point de transition $\Delta = -1$ ne correspond pas à une transition du premier ordre mais à un point multicritique de dimension infinie [BENGUIGUI77]. La plupart des observables changent violemment à la transition, comme lors d'une transition du premier ordre. Ceci explique pourquoi les principaux indicateurs tels que les cumulants de Binder ou la chaleur spécifique présentent un caractère « premier ordre ». Ce type de transition est observé pour des modèles classiques en deux dimensions [SLATER41, LIEB67], mais aussi pour un modèle d'Ising sur le réseau pyrochlore en présence de distortion [JAUBERT10].

Enfin, signalons que la même phase basse température, et probablement la même transition, sont observées dans deux modèles de dimères classiques sur le réseau hexagonal, obtenus comme modèles effectifs pour des systèmes de spins quantiques avec anisotropie sur site sur le réseau kagome ou triangulaire [SEN08, SEN09].

IV.5. Réseau triangulaire

Considérons maintenant un modèle de dimères en interaction sur le réseau triangulaire. La physique doit être complètement différente de celle du réseau carré, puisque sans interaction le système n'est pas critique. Au lieu d'étudier directement le cas d'un réseau triangulaire isotrope (qui va se révéler assez complexe), partons de la limite connue du réseau carré en considérant tout d'abord un système anisotrope.

Modèle anisotrope

Il y a deux voies possibles pour déformer le modèle du réseau carré vers le réseau triangulaire : introduction de *liens* sur la diagonale des plaquettes où les dimères résideront avec une fugacité z_T et/ou d'*interactions* (dénotées u) sur les plaquettes formées par ces liens. Ces différents termes dans la nouvelle fonction de partition sont schématisés dans la Fig. 29.

Prenons tout d'abord $u = 0$ (avec toujours $v = -1$) et étudions la limite $z_T \ll 1$. Étant perturbativement proche du réseau carré décrit par l'action sine-Gordon Éq. (6), il sera suffisant de regarder la dimension d'échelle de la perturbation apportée par les dimères diagonaux. Il est facile de se convaincre que dans la limite de faible fugacité, la situation est identique à celle de deux monomères situés sur le même sous-réseau du réseau carré. L'opérateur d'insertion de ces dimères diagonaux est donc un opérateur de vertex de charge magnétique $|m| = 2$. Le GdC nous indique alors que cette perturbation sera pertinente si $g < 1$. Nous vérifions ici que sans interaction ($g = 1/2$), l'introduction même infinitésimale de dimères diagonaux, rend non critique le système sur le réseau carré. Ceci avait été observé numériquement [SANDVIK06], et est en accord avec la règle empirique énoncée au Chapitre I qui indique que tout réseau bidimensionnel non

bipartite (ayant un seul site par cellule élémentaire) conduit à une phase liquide de dimères. Toutefois, il subsiste une région de constante de couplage $1 \leq g \leq 4$, où le système reste critique (pour $g > 4$, le système s'ordonne en colonnes). Il est donc possible d'exhiber un modèle sur le réseau triangulaire (éventuellement anisotrope) qui soit dans une phase critique, et ceci en contradiction avec l'intuition du premier chapitre. L'ingrédient essentiel est bien sûr l'introduction d'interactions v qui change la valeur de la constante de couplage du modèle non perturbé. Le diagramme de phase prédit est constitué par une phase critique à température intermédiaire, encadrée par une phase liquide à haute température et une phase colonnaire à basse température.

Le GdC ne fournissant qu'une analyse perturbative, il est légitime de se demander si cette conclusion tient pour une valeur finie de la fugacité z_T . Les calculs matrice de transfert effectués par F. TROUSSELET [TROUSSELET07] montrent que c'est le cas : il existe bien une phase critique à température intermédiaire, et ceci jusqu'à la limite isotrope $z_T = 1$. La gamme de températures pour laquelle le système est critique diminue avec z_T , ce qui est naturel puisque les dimères diagonaux ne peuvent participer au quasi-ordre colonnaire. Il est intéressant de constater que cette phase critique subsiste aussi à l'introduction d'interactions u entre dimères diagonaux, et ceci même dans la limite isotrope $z_T = 1$ jusqu'à $v/u \sim 0.7$ [TROUSSELET07].

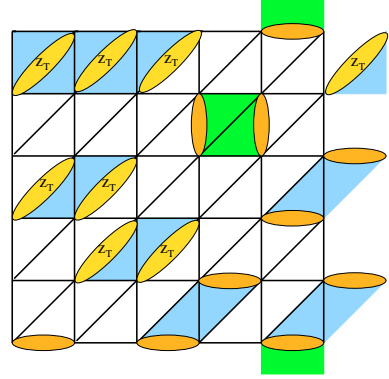


Fig. 29 Illustration du modèle de dimères classiques anisotrope sur le réseau triangulaire. Les dimères diagonaux possèdent une fugacité z_T différente de celle des autres dimères. Les interactions entre dimères autour d'une plaquette « carrée » (en vert sur la figure) sont toujours égales à v , alors que celles autour d'une plaquette « diagonale » (en bleu) prennent une valeur u .

Modèle isotrope

Au delà de $v/u \sim 0.7$, la phase critique disparaît pour $z_T = 1$ et il reste simplement une transition entre une phase haute température liquide et une phase colonnaire à basse température. Dans la limite entièrement isotrope $z_T = 1$ et $v = u$, la situation peut être considérablement modifiée. En effet, le fondamental n'est plus simplement quatre fois dégénéré comme pour $z_T < 1$. À première vue, 12 fondamentaux colonnaires semblent se dégager (6 pour la coordinence du réseau triangulaire, fois 2 pour l'orientation des colonnes). Comme remarqué pour la première fois pour un modèle de dimères quantiques [MOESSNER01], il s'avère qu'il est possible de créer des défauts sans coût énergétique dans ces pavages colonnaires (voir une illustration de ces défauts dans la Réf. [Trousselet07]). En conséquence, le fondamental est hautement dégénéré dans le cas isotrope, avec une dégénérescence de l'ordre $\exp(\alpha L)$. La situation est analogue de ce point de vue à celle du réseau carré avec des interactions répulsives $v > 0$. Il apparaît donc possible que le système ne s'ordonne pas à la limite thermodynamique, même à température nulle.

Toutefois, il est possible que cela soit le cas par un effet d'ordre par le désordre [VILLAIN80]. En effet, les fluctuations thermiques préfèrent les états les mieux connectés entropiquement, et peuvent donc sélectionner certains états parmi ceux qui sont énergétiquement équivalents. Dans le cas du modèle de dimères quantiques, MOESSNER et SONDHI [MOESSNER01] ont montré en effectuant un développement en puissance du terme cinétique que les 12 états colonnaires « purs » étaient en effet favorisés par rapport aux états avec défauts. Étant donnée l'équivalence déjà discutée entre fluctuations cinétiques dans le modèle quantique et fluctuations thermiques dans le modèle classique, il semble possible que ce scénario d'ordre par le désordre agisse pour le modèle classique sur le réseau triangulaire isotrope. C'est en effet le cas comme le montre les calculs numériques [Trousselet07], et il existe bien une transition à température finie $T_c \sim 0.2$ vers une phase colonnaire pour le modèle de dimères en interactions sur le réseau triangulaire isotrope.

IV.6. Modèle de dimères quantiques, dopage en monomères

Modèle non dopé

Il est bien connu [ROKHSAR88] que le fondamental du modèle de dimères quantiques sur le réseau carré Éq. (1) est entièrement déterminé au point RK par la fonction de partition $Z_{v=0}$ du modèle de dimères classiques sans interaction :

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z_{v=0}}} \sum_c |c\rangle \quad \text{Éq. (14)}$$

où la somme s'étend sur tous les pavages de dimères c du réseau carré.

On peut se poser la question : existe-t-il un modèle de dimères quantiques dont le fondamental est donné par la même formule que l'Éq. (14), mais avec cette fois la fonction de partition du modèle de dimères en interactions Éq. (2)

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z}} \sum_c \exp(-E_c/T) |c\rangle ? \quad \text{Éq. (15)}$$

La réponse est positive, et la construction d'un tel modèle, très proche de celle de Rokhsar

et Kivelson [ROKHSAR88], a été formulée de manière générale par CASTELNOVO *et al.* [CASTELNOVO05]. Sans entrer dans les détails, l'idée est de compenser chaque terme cinétique hors diagonal $H_{cc'}$ par un terme potentiel diagonal $H_{cc}(c')$ qui va dépendre des configurations c' pour lesquelles $H_{cc'}$ est non nul. Explicitons la forme d'un tel Hamiltonien de dimères quantiques, qui s'écrit

$$H_{v\text{-QDM}} = \sum_c \epsilon_c |c\rangle\langle c| - t \sum_{(c,c')} |c'\rangle\langle c|$$

où la seconde somme s'étend sur toutes les paires de configurations de dimères (c, c') différant par un flip. Prenant $t = 1$ pour définir l'échelle d'énergie, il est facile de voir que si

$$\epsilon_c = \sum_{c'} \exp \left[-\frac{\beta_Q v}{2} \left[N^{c'}(\text{□}) + N^{c'}(\text{◻}) - N^c(\text{□}) - N^c(\text{◻}) \right] \right],$$

alors $|\psi_0\rangle$ s'écrit bien sous la forme de l'Éq. (15). Ici $\beta_Q \equiv 1/T$ est un nouveau paramètre du Hamiltonien quantique et v est le paramètre du modèle classique, pris encore une fois égal à -1. Par construction, ce modèle présentera un diagramme de phase à température nulle (obtenu en variant le paramètre β_Q) identique à celui du modèle classique (obtenu en variant la température). En particulier, nous y trouverons une phase critique étendue avec des exposants variant continûment et une transition Kosterlitz-Thouless à température nulle [CASTELNOVO07].

Dopage en monomères mobiles

Nous pouvons aller plus loin, et construire un modèle de dimères quantiques avec monomères mobiles dont le fondamental sera donné cette fois-ci par un modèle de dimères classique, dopé en monomères (en nombre fixé). Il suffit pour cela de rajouter un terme cinétique et potentiel :

$$\text{Éq. (16)} \quad H_{v\text{-QDMm}} = H_{v\text{-QDM}} + \sum_c \epsilon'_c |c\rangle\langle c| - t_m \sum_{(c,c'')} |c''\rangle\langle c|$$

avec $\epsilon'_c = V_m \sum_{c''} \exp \left[-\frac{\beta_Q v}{2} \left[N^{c''}(\text{□}) + N^{c''}(\text{◻}) - N^c(\text{□}) - N^c(\text{◻}) \right] \right]$ et $V_m = t$. Ici c'' est une configuration connectée à c par un saut de monomères tel que celui représenté dans la Fig. 30. La construction pour un modèle avec nombre de monomères non fixé (avec une certaine fugacité pour les monomères comme dans la Sec. IV.3) est donnée dans la Réf. [PAPANIKOLAOU07].

Cette procédure nous permet de construire des modèles quantiques ayant un fondamental « classique », ce qui permet de les simuler très facilement. En effet, connaissant le fondamental, il suffit d'effectuer des simulations sur le modèle classique équivalent (soit par Monte Carlo classique, soit par matrice de transfert) pour obtenir les propriétés du modèle quantique [HENLEY97]. Toutefois, ces points Rokhsar-Kivelson généralisés ne sont pas forcément représentatifs de l'ensemble des phases accessibles aux modèles de dimères quantiques et il est intéressant de se demander quelles sont les propriétés physiques en dehors de ces points, par exemple lorsque $V_m \neq t_m$. Il est nécessaire par contre de recourir à des méthodes purement quantiques (telles que la diagonalisation exacte ou la méthode Monte Carlo quantique « Fonction de Green »). Lorsque $t_m = V_m = 1$, les résultats obtenus sur le modèle classique indiquent que deux monomères tests sont confinés dans la phase colon-

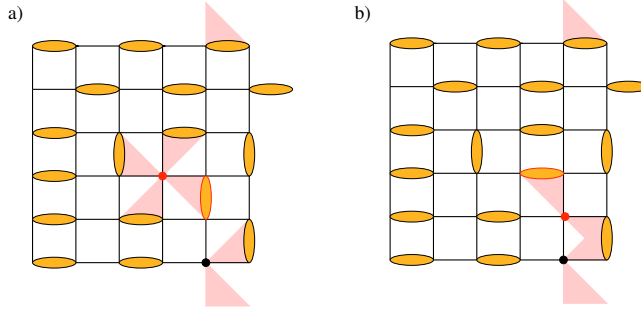


Fig. 30 Illustration du terme de saut de monomère dans le modèle de dimères quantiques dopé en monomères (Éq. (27)). Un monomère (dénoté en rouge) peut sauter le long de la diagonale d’une plaquette seulement si celle-ci possède un dimère correctement placé. Les configurations des figures a) et b) sont reliées par un terme hors-diagonal d’amplitude t_m . Les termes diagonaux V_m sont représentés dans chaque configuration par un triangle coloré.

naire, et déconfinés (algébriquement) dans la phase critique. Si l’on diminue le paramètre de saut des monomères $t_m < V_m$, les calculs de diagonalisation exacte et de Monte Carlo quantique (effectués par D. POILBLANC et F. BECCA respectivement) montrent que les deux monomères sont confinés et forment un état lié dans toute la phase critique [POILBLANC06].

Lorsque l’on dope avec une densité de monomères finie, il est important de préciser la statistique quantique des monomères⁹, prise bosonique ici. En utilisant des arguments qualitatifs [POILBLANC06], on s’attend à ce que la phase critique ne subsiste pas à dopage fini au contraire de la phase cristalline (comme cela se déduit du diagramme de phase classique de la Fig. 25), mais aussi que le système monomères-dimères subisse une séparation de phase lorsque $V_m > t_m$. Le diagramme de phase conjecturé dans la Réf. [POILBLANC06] est présenté Fig. 31.

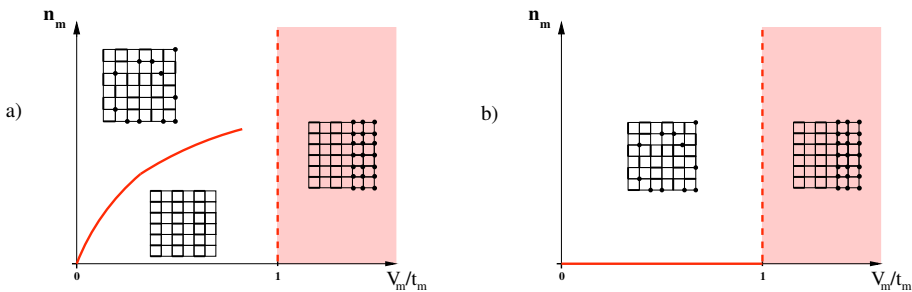


Fig. 31 Diagramme de phase schématique du modèle de dimères quantiques dopé Éq. (16) en fonction de la densité finie n_m de monomères. a) Pour $\beta_Q^{-1} < \beta_Q^{-1}|_c \sim 0.65$: à faible densité et faible V_m/t_m , le système reste cristallin. En augmentant n_m , le cristal fond pour donner lieu à une phase liquide dimères-monomères sans ordre à longue portée. Pour $V_m > t_m$, le système subit une séparation de phase. b) Pour $\beta_Q^{-1} > \beta_Q^{-1}|_c$, la phase cristalline disparaît et ne subsiste qu’à travers une phase critique à densité de monomères strictement nulle.

⁹ Si le système ne contient que deux monomères, ceux-ci résident sur des sous-réseaux différents et la statistique fermionique ou bosonique n’intervient pas (les monomères ne se voient pas)

PARTIE 2 :

Dimères classiques en trois dimensions

Nous abordons dans cette partie la physique de dimères sur des réseaux tridimensionnels. Nous allons jouer exactement au même jeu que celui en deux dimensions de la : mettre des dimères sur un réseau bipartite, brancher les interactions et voir comment la phase haute température s'ordonne. L'analogie avec l'électromagnétisme entrevue à travers le gaz de Coulomb en dimension deux va se révéler encore plus frappante ici, à travers l'apparition d'une *phase Coulombienne*. En perturbant cette phase en assignant une énergie d'interaction entre dimères, le système va transiter vers une phase cristalline pour les dimères, et la transition Coulomb-cristal associée est particulièrement exotique. Cette transition a en effet toutes les marques indiquant qu'elle ne peut être décrite correctement par l'analyse conventionnelle à la Ginzburg-Landau-Wilson des transitions de phases. Cette partie s'organise de la façon suivante: dans le [Chapitre V](#), nous allons tout d'abord discuter du peu de résultats exacts connus sur les pavages de dimères en trois dimensions. Nous allons ensuite procéder à une transformation qui va illuminer notre compréhension de la physique des dimères en trois dimensions sur réseau bipartite. L'intuition développée sera cultivée par la confrontation avec des simulations pour permettre une description poussée de la phase de Coulomb ainsi révélée. Dans le [Chapitre VI](#), nous introduirons ensuite le modèle de physique statistique de dimères en interaction et l'analyserons à l'aide de simulations Monte Carlo. Un grand effort numérique sera effectué pour comprendre ce qui se passe proche de la transition de phase. Une fois les certitudes numériques acquises, nous donnerons les pistes dans le [Chapitre VII](#) pour construire une théorie analytique capable de rendre compte de la nature non conventionnelle de cette transition. Nous verrons comment les résultats des simulations au point critique contraignent fortement cette théorie, et comment celle-ci peut être reliée à d'autres résultats récents sur les points critiques quantiques déconfinés. Dans le [Chapitre VIII](#), nous présenterons des résultats sur des extensions du modèle originel qui permettent de trancher entre les différents scénarios théoriques. Une conclusion est alors donnée pour l'ensemble du problème.

Chapitre V. Dimères classiques en trois dimensions et phase Coulombienne

L'histoire racontée dans ce chapitre va nous permettre de passer des lois bien connues de la magnétostatique (loi de Gauss, énergie magnétique dipolaire) jusqu'aux concepts importants de l'électrodynamique quantique parmi lesquels la transition confinement-déconfinement, les boucles de Wilson ou encore les champs de jauge non compacts. Tout ceci se passera à travers le filtre d'un modèle simple de physique statistique qui *a priori* possède peu de rapports avec l'électromagnétisme. Les termes d'*électromagnétisme fictif* ou de *photons émergents* prendront ainsi tout leurs sens.

V.1. Dimères en trois dimensions et énergie libre effective

Pavages de dimères en 3 dimensions

Nous ne considérons encore une fois que les pavages compacts, avec dimères de cœur dur : il y a un et un seul dimère par site. Il est acquis depuis les travaux initiaux sur les dimères (en particulier les résultats de développement en séries [NAGLE66]) que les pavages de réseaux tridimensionnels possèdent une entropie extensive, comme leurs semblables en deux dimensions. Contrairement au cas bidimensionnel, il n'existe cependant pas de résultats exacts concernant le nombre de pavages par des dimères sur un réseau cubique par exemple¹⁰. En particulier, la méthode des Pfaffiens n'est plus disponible car on ne peut satisfaire à la règle de Kasteleyn pour des graphes non planaires. Le problème a attiré l'attention de la communauté mathématique car il est relié à la conjecture de van der Waerden sur les permanents des matrices doublement stochastiques (c.-à-d. à éléments réels dont la somme sur chaque colonne et ligne vaut l'unité). Les derniers résultats [LUNDOW01,SCHRIJVER98] indiquent par exemple que le nombre de pavages d'un réseau cubique simple avec $N = L^3$ sites croît comme $\#_{3d} = \exp(s_{3d}N)$, avec $0.440075 \leq s_{3d} \leq 0.457547$ (à comparer à $s_{2d} = 0.2915609 \dots$). À noter que les mêmes techniques mathématiques peuvent être appliquées au cas avec monomères (pour une revue, voir Réf. [FRIEDLAND05]).

Acquis que les pavages de réseaux tridimensionnels possèdent une entropie finie, nous avons le droit de nous intéresser à leur physique statistique. Au lieu de directement présenter des résultats numériques, nous allons immédiatement effectuer un petit calcul illustratif en guise d'*ansatz* de la physique des dimères en 3 dimensions. Grâce à notre connaissance des systèmes 2d, nous anticipons deux physiques différentes selon le caractère bipartite ou non du réseau sur lequel vivent les dimères. Pour la suite, nous allons essentiellement considérer des réseaux bipartites tridimensionnels, dont l'exemple canonique est le réseau cubique simple.

L'existence d'une phase coulombienne telle que nous allons la décrire par la suite était connue de plusieurs pour des modèles de dimères en trois dimensions, mais a été démontrée et formalisée pour la première fois par Huse *et al.* [HUSE03]. Nous nous basons sur leurs travaux pour décrire cette physique. Notons que depuis l'écriture de ces lignes, une revue [HENLEY10] est apparue sur les propriétés des phases de Coulomb : sa lecture est complémentaire de ce chapitre.

¹⁰ À noter toutefois des résultats sur des réseaux plus « simples », comme le réseau hyperkagomé [DHAR08]

Champ magnétique fictif

Pour coder la nature de cœur dur des dimères, considérons en chaque site \mathbf{r} un champ vectoriel $B^\alpha(\mathbf{r})$ à trois composantes $\alpha = x, y, z$, qui vont vivre sur les liens du réseau dans la direction $+\alpha$ de vecteur unitaire \mathbf{e}_α . Choisissons:

$$B^\alpha(\mathbf{r}) = (-)^{\mathbf{r}}(d^\alpha(\mathbf{r}) - 1/z), \quad \text{Éq. (17)}$$

avec $z = 6$ la coordinnence du réseau cubique et $d^\alpha(\mathbf{r})$ le nombre d'occupation du lien α au site \mathbf{r} par un dimère. Le signe alterné $(-)^{\mathbf{r}}$ distinguant les deux sous-réseaux nous permet de définir en chaque site les composantes du champ vectoriel dans les directions $-\alpha$ telles que : $B^{-\alpha}(\mathbf{r}) = -B^\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{e}_\alpha)$. Le caractère compact du pavage de dimères et la contrainte de cœur dur s'encodent tout simplement par:

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) = 0, \quad \text{Éq. (18)}$$

c.-à-d. une condition de divergence (sur le réseau) nulle du champ vectoriel. Nous remarquons immédiatement que la bipartité du réseau est indispensable pour obtenir un tel résultat. \mathbf{B} étant de divergence nulle, nous pouvons définir le champ de jauge $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ tel que $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$. Jusqu'ici tout est exact, mais nous n'avons pas avancé. Nous faisons maintenant notre première approximation (raisonnable) en effectuant une étape de *coarse-graining* pour promouvoir le champ $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ dans le continu. Pour ceci, nous suivons la même procédure que celle de la Sec. III.1.1 pour le champ de hauteur dans le cas bidimensionnel.

Action effective et corrélations dipolaires

Il est clair que les dimères interagissent de façon effective à travers la condition de cœur dur. Nous allons tenter, comme en 2d, de décrire cette « interaction entropique » par une énergie libre effective écrite en terme des « bonnes » variables $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ ou $\mathbf{A}(\mathbf{r})$. Prenons pour ansatz :

$$\mathcal{F}_{\text{eff}} = \frac{K}{2} \int d^3\mathbf{r} \mathbf{B}^2(\mathbf{r}) = \frac{K}{2} \int d^3\mathbf{r} (\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}))^2. \quad \text{Éq. (19)}$$

Pourquoi un tel choix ? Comme toujours, on souhaite que les termes pertinents concernent uniquement les premières puissances des « bonnes » variables (ce qui indique qu'on ne prend pas en compte les puissances supérieures $\mathbf{B}^4(\mathbf{r}), \mathbf{B}^6(\mathbf{r})$ etc) et l'on souhaite aussi minimiser le nombre de dérivées de ces variables (pas de termes $\nabla \times \mathbf{B}$ etc). Pour des raisons de symétrie, les termes linéaires en \mathbf{B} ou anisotropes en B^α sont aussi absents. Enfin et surtout, remarquons que la contrainte Éq. (18) est très forte, puisqu'elle impose dans l'énergie libre effective d'écrire uniquement des termes *invariants de jauge*. C'est pourquoi nous n'avons pas considéré des termes en \mathbf{A}^2 , qui possèdent pourtant moins de dérivées d'espace que le terme principal en \mathbf{B}^2 .

Ce choix semble donc raisonnable. Imaginons maintenant qu'il soit correct et décrive la physique de grande longueur d'onde et dans le continu des pavages de dimères en trois dimensions. Les Éq. (18) et Éq. (19) se réinterprètent immédiatement comme la loi de Gauss et comme l'énergie du « champ magnétique effectif » \mathbf{B} : les dimères en trois dimensions sont alors régis par les lois de l'électromagnétisme. En particulier, chaque dimère est vu comme un dipôle magnétique et les corrélations entre dimères sont dipolaires :

$$\langle d^\alpha(\mathbf{0})d^\beta(\mathbf{r}) \rangle^c = \langle d^\alpha(\mathbf{0})d^\beta(\mathbf{r}) \rangle - 1/z^2 = \frac{(-)^{\mathbf{r}}}{4\pi K} \frac{3r^\alpha r^\beta - \mathbf{r}^2 \delta_{\alpha\beta}}{\mathbf{r}^5}. \quad \text{Éq. (20)}$$

Cette équation se déduit des Éq. (18) et Éq. (19) par transformée de Fourier et intégrale gaussienne.

Avant de poursuivre l'analogie électromagnétique plus loin, il faut s'assurer qu'elle est correcte. Pour ceci, nous allons vérifier que les corrélations entre dimères sont bien dipolaires. Pour simplifier, prenons le cas de dimères parallèles $\alpha = \beta = x$ et l'Éq. (20) devient

$$\text{Éq. (21)} \quad \langle d^x(\mathbf{0})d^x(\mathbf{r}) \rangle^c = \frac{(-)^{\mathbf{r}}}{4\pi K} \frac{3 \cos^2(\Theta) - 1}{r^3},$$

avec Θ , l'angle entre \mathbf{r} et la direction des dimères. Suivons la Réf. [HUSE03] et considérons des vecteurs \mathbf{r} dans plusieurs directions : suivant \mathbf{e}_x ($\Theta = 0$, notée [110]), \mathbf{e}_y ($\Theta = \pi/2$, notée [010]), $\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y$ ($\Theta = \pi/4$, notée [110]) et $\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z$ ($\Theta = \arccos(1/\sqrt{3})$, notée [111]). Sur la Fig. 32 sont représentées les fonctions de corrélations connexes dans ces directions multipliées par un facteur $(-)^{\mathbf{r}}.z^2.r^3$ en fonction de la distance $r = |\mathbf{r}|$ entre les dimères, calculées avec l'algorithme Monte Carlo de ver pour un système de taille linéaire $L = 128$. Pour r suffisamment grand, il est clair que toutes les courbes tendent vers une constante. Compte tenu du facteur multiplicatif, cela indique une décroissance à grande distance des fonctions de corrélations en $1/r^3$, comme prévu par la formule dipolaire Éq. (21). Considérons maintenant la dépendance angulaire de la constante à longue distance et prenons pour référence la valeur prise dans la direction [100]. L'Éq. (21) prévoit des rapports respectifs $-1/2$, $1/4$ et 0 avec cette valeur de référence pour les constantes dans les directions [010], [110] et [111] respectivement. Reportant ces valeurs prévues par des traits pleins sur la Fig. 32, nous trouvons un accord excellent avec les données numériques.

Obtenir des fonctions de corrélations dipolaires (anisotropes) dans un modèle simple entièrement isotrope est hautement non trivial. Le calcul numérique des fonctions de corrélations dimère-dimère confirme donc de façon claire l'analogie électromagnétique avancée jusqu'ici intuitivement et valide en particulier l'hypothèse de l'énergie libre effective quadratique Éq. (19). Effectuons deux remarques sur ce qui peut être obtenu de façon supplémentaire de la Fig. 32. Tout d'abord, la valeur asymptotique des fonctions de corrélations

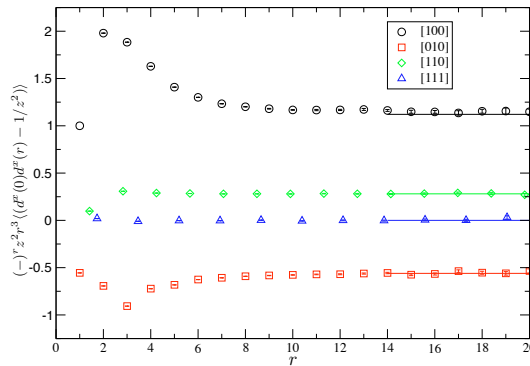


Fig. 32 Fonction de corrélation connexe $\langle d^x(\mathbf{0})d^x(\mathbf{r}) \rangle^c$ (multipliée par $(-)^{\mathbf{r}}.z^2.r^3$) entre deux dimères pointant dans la même direction séparés par \mathbf{r} , en fonction de la distance r , pour un échantillon de taille linéaire $L=128$. Sont représentés les corrélateurs dans quatre directions différentes, correspondant à des valeurs différentes de l'angle Θ entre la direction des dimères et celle de \mathbf{r} .

(multipliées par r^3) nous permet d'estimer la valeur de K (jusque là non connue) dans l'Éq. (19). Nous utiliserons toutefois une méthode alternative plus précise plus bas pour calculer cette constante de couplage. Ensuite, nous remarquons que pour les distances $r \lesssim 8$, les fonctions de corrélations prennent des valeurs assez différentes de leur valeur asymptotique à longue distance. C'est tout à fait normal : l'Éq. (20) est issue d'une théorie dans le continu valable à longue distance qui ne prétend pas reproduire les effets à courte distance pour le modèle sur réseau. On s'attend en particulier à une forte contribution des effets du réseau à courte distance, étant donnée l'interaction de cœur dur entre les dimères. La précision de ces informations locales est en fait perdue dans l'étape de coarse-graining : en effet, avec la condition de divergence nulle du champ $B(\mathbf{r})$, on ne retient la contrainte de cœur dur et de compacité uniquement de façon *moyennée* spatialement, et non pas de façon exacte. Toutefois, il est notable de remarquer qu'en considérant les effets de taille finie sur la théorie dans le continu (en utilisant une somme finie sur le réseau), Huse *et al.* [Huse03] ont réussi à capturer de manière satisfaisante les fonctions de corrélations pour un échantillon de taille finie faible ($L = 32$), et ceci même à courte portée. Cela signifie que même s'il n'y a aucune raison pour que l'énergie libre effective Éq. (19) soit bonne à courte portée, elle n'est pas si mauvaise que ça !

Complétons la réinterprétation de la physique des dimères en termes magnétiques. La constante K joue le rôle de perméabilité magnétique du milieu des dimères, et est fixée par les détails du modèle microscopique. Elle ne peut se déduire simplement de considérations microscopiques à cause de l'étape de coarse-graining, mais peut se calculer numériquement en étudiant les fluctuations de flux magnétiques.

Flux magnétique et dégénérescence topologique

La conservation du champ magnétique de l'Éq. (18) impose que l'on peut définir pour toute surface Σ (ne contenant pas de sites du réseau) un flux magnétique $\Phi_\Sigma = \int_\Sigma \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}$, qui prend une interprétation simple en termes de flux de dimères : il s'agit du nombre algébrique de dimères traversant cette surface. Comme dans le calcul du nombre de winding dans le Chapitre I, nous choisissons une convention d'orientation d'un sous-réseau à un autre et comptons chaque dimère assigné d'un facteur ± 1 selon l'orientation du lien sur lequel il se trouve. La conservation du flux magnétique Φ_Σ va jouer un rôle essentiel dans la description de la phase Coulombienne. Considérons par exemple comme surface Σ un plan perpendiculaire à une des trois directions du réseau (par exemple \mathbf{e}_x). Il est facile de s'apercevoir (voir Fig. 33a) que le nombre algébrique de dimères coupant cette surface et donc le flux magnétique Φ_x sont *conservés* plan à plan pour toute valeur de x (pour des systèmes à conditions aux bords périodiques). En particulier, il n'est pas possible de le changer avec un réarrangement local des dimères : nous sommes forcés d'effectuer un mouvement non local passant par les conditions aux bords pour changer ce flux (voir illustration dans la Fig. 33b).

Nous pouvons répéter l'argument dans les trois directions pour s'apercevoir qu'il y a trois invariants topologiques Φ_x, Φ_y, Φ_z pour toute configuration de dimères avec conditions aux bords périodiques. Il est très clair que $\Phi = (\Phi_x, \Phi_y, \Phi_z)$ joue un rôle analogue aux nombres de winding (W_x, W_y) introduits dans le cas bidimensionnel (en 2d, nous avons la stricte équivalence $\Phi_\alpha = W_\alpha$). Les configurations peuvent se classer dans des secteurs topologiques différents classifiés par ce flux. Le flux magnétique Φ_α peut varier d'une valeur nulle (pour les configurations « plates » telles que les configurations colonnaires) jusqu'à

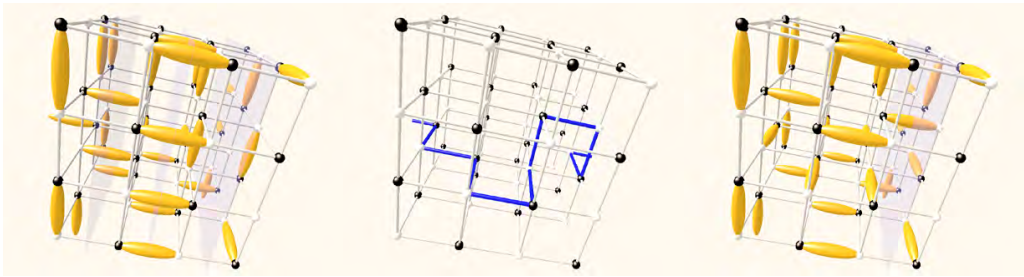


Fig. 33 Le flux (*i.e.* le nombre algébrique de dimères) traversant une surface (ici le plan grisé) est une quantité conservée (ici identique pour tous les plans translétés). Seul un mouvement non-local (représenté ici par le chemin bleu sur la figure du milieu) passant par les conditions aux bords permet de changer de secteur de flux en emmenant ici la configuration de dimères de gauche à celle de droite.

$\pm L^2/2$ pour les configurations alternées. Comme en deux dimensions, la conservation de ce nombre algébrique nous indique que la symétrie de la théorie de jauge décrivant les dimères est $U(1)$, par opposition à une symétrie Z_2 où seule la parité de ce nombre serait conservée. Ceci est bien sûr consistant avec notre description électromagnétique.

En écrivant l'énergie libre effective Éq. (19), nous avons complètement ignoré cette dégénérescence topologique et l'existence de secteurs de flux magnétiques. Comment peut-on alors prétendre décrire correctement la physique statistique des dimères si l'on oublie cet ingrédient essentiel ? Encore une fois, ce sont des arguments entropiques qui vont nous sauver la mise. En effet, comme c'est le cas en deux dimensions où le secteur plat domine, nous avons ici une prédominance entropique du secteur de flux nul $(\Phi_x, \Phi_y, \Phi_z) = (0, 0, 0)$ qui possède beaucoup plus de configurations que les autres secteurs de flux. L'argument reste le même : les configurations colonnaires sont les plus flippables et donc les mieux connectées dans l'espace des configurations, ce qui donne au secteur de flux nul (auquel appartiennent les configurations colonnaires) la plus grande entropie. Cet argument n'est valide qu'au premier ordre en « flippabilité » (et n'est donc pas strict) mais se trouve facilement vérifié dans les simulations numériques. Nous pouvons donc oublier *dans la limite thermodynamique* les autres secteurs de flux, ce qui justifie *a posteriori* l'oubli de la dégénérescence topologique dans l'énergie libre Éq. (19). L'entropie favorisant le secteur de flux nul, on comprend aussi que les autres secteurs soient pénalisés par le terme en \mathbf{B}^2 dans cette énergie libre.

Il est toutefois instructif de considérer les secteurs de flux non nuls. En effet, toutes les simulations numériques sont effectuées sur des systèmes finis où les effets de ces autres secteurs peuvent ne pas être négligeables. De fait, nous allons par la suite explicitement mettre à profit l'existence de ces secteurs dans les calculs numériques. HUSE *et al.* [HUSE03] ont montré la marche à suivre. Plaçons-nous dans un secteur de flux fixé $\Phi = (\Phi_x, \Phi_y, \Phi_z)$ pour un système de taille linéaire L et considérons l'approximation où tous les dimères contribuent équitablement au flux total. Ceci est raisonnable dans le continu après l'étape de coarse-graining. Le champ magnétique local peut se réécrire $\mathbf{B}_\Phi(\mathbf{r}) = \sum_\alpha \Phi_\alpha / L^2 + \mathbf{B}_0(\mathbf{r})$ où $\mathbf{B}_0(\mathbf{r})$ ne porte pas de flux. Ré-injectant cette expression dans l'Éq. (19) et en intégrant sur l'espace (les termes linéaires en \mathbf{B}_0 s'annulant par symétrie), nous obtenons :

$$\text{Éq. (22)} \quad \mathcal{F}_{\text{eff}}(\Phi) = \frac{K\Phi^2}{2L} + \frac{K}{2} \int d^3\mathbf{r} \mathbf{B}_0^2(\mathbf{r}) = \frac{K\Phi^2}{2L} + \mathcal{F}_{\text{eff}}(\Phi = 0).$$

Ici nous avons négligé les effets d'anisotropie induite par le flux sur la constance de couplage K (ces effets sont d'ordre $1/L^3$ [Huse03]). Comme espéré, nous retrouvons bien à flux nul l'Éq. (19). Le premier terme de cette équation est particulièrement instructif car il nous permet de voir dimensionnellement que dans la phase Coulombienne (avec K fini), le flux typique est d'ordre $[\Phi] \sim [L^{1/2}]$. Ceci est à opposer à la même situation en 2d où le flux (le nombre de winding) typique est lui d'ordre $O(1)$ dans la phase critique. De plus, nous voyons aussi par analyse dimensionnelle que $[K^{-1}] \sim [\Phi^2/L]$. Nous allons dériver plus bas la relation exacte entre ces quantités.

Avec cette nouvelle énergie libre effective qui tient compte des secteurs de flux magnétiques, nous savons maintenant recalculer correctement les observables pour des systèmes de taille finie. En effet, nous voyons que toute quantité calculée dans un secteur de flux fixe Φ donné doit être pondérée d'un facteur « Boltzmannien » $P(\Phi) = \exp(\frac{K\Phi^2}{2L})$ par rapport à la quantité nue dans le secteur de flux nul. Pour les fonctions de corrélations en particulier, nous avons $\langle d^\alpha(\mathbf{0})d^\beta(\mathbf{r}) \rangle_\Phi^c = \Phi_\alpha \Phi_\beta / L^4 + \langle d^\alpha(\mathbf{0})d^\beta(\mathbf{r}) \rangle_{\Phi=0}^c$. En pondérant comme indiqué, le premier terme s'intègre en $\delta_{\alpha\beta}/(KL^3)$ qui constitue donc une constante corrective due aux secteurs de flux à la forme dipolaire précédemment établie. Pour des échantillons de taille suffisamment grande, cette correction est négligeable (nous discuterons plus précisément de ce point plus bas).

Nous avons vu que dimensionnellement $[K^{-1}] \sim [\Phi^2/L]$. Calculons maintenant précisément les fluctuations de flux magnétique. La partie sans flux se factorise et on obtient tout simplement l'intégrale gaussienne :

$$\langle \Phi^2 \rangle = \frac{\int d\Phi \Phi^2 \exp(\frac{K\Phi^2}{2L})}{\int d\Phi \exp(\frac{K\Phi^2}{2L})} = L/K$$

où les moyennes thermodynamiques $\langle \dots \rangle$ sont maintenant prises dans l'ensemble avec flux. Les fluctuations de flux sont contrôlées par la constante de couplage K , ou de façon inverse :

$$K^{-1} = \frac{\langle \Phi^2 \rangle}{L} \tag{Éq. (23)}$$

Nous avons raffiné l'analyse dimensionnelle en obtenant le préfacteur exact, et nous avons surtout obtenu une manière d'obtenir la constante de couplage, qui se révèle particulièrement efficace numériquement. L'expression simple de K est à comparer à l'expression plus complexe obtenue pour g dans le cas bidimensionnel (voir Éq. (12)). Cette différence provient du fait qu'en 2d, les fluctuations de flux sont *discrètes* (et essentiellement dominées par les faibles valeurs de flux) alors qu'en 3d, le préfacteur en $1/L$ dans le poids $P(\Phi) = \exp(\frac{K\Phi^2}{2L})$ nous assure de la nature *continue* des flux magnétiques.

Nous avons représenté en traits pleins dans la Fig. 32 les valeurs $[3 \cos^2(\Theta) - 1] z^2 / 4\pi K$ où K est obtenu par l'Éq. (23) en mesurant numériquement les fluctuations de flux magnétique. Les valeurs obtenues pour les différentes valeurs de Θ sont en parfait accord avec les valeurs asymptotiques vers lesquelles tendent les fonctions de corrélation dimère-dimère. À noter que la correction due aux flux est en $\frac{z^2}{K} (\frac{r}{L})^3$ dans les unités de la Fig. 32 et se trouve

totallement négligeable par rapport à la valeur nue $[3 \cos^2(\Theta) - 1] z^2/4\pi K$ (sauf bien sûr dans le cas de la direction [111]). Avec cette comparaison, nous validons à la fois l'analogie coulombienne (en montrant que le préfacteur des fonctions de corrélation est bien celui attendu) ainsi que la méthode de fluctuations des flux pour calculer K . Finalement, notons que la détermination de K par cette méthode de flux est très précise : nous obtenons $K = 5.12(1)$ alors que Huse *et al.* [HUSE03] trouvent $K = 4.9(1)$ en fittant les fonctions de corrélations dimère-dimère.

En résumé, la dégénérescence topologique liée à l'existence de secteur de flux magnétiques conservés se révèle être non pas une complication, mais plutôt une chance car elle nous permet de valider notre théorie tout en facilitant le calcul d'une quantité centrale à la théorie. Enfin, plus simplement et en reprenant l'argument à l'envers, on peut affirmer qu'il n'y aurait pas de phase de Coulomb sans les flux magnétiques, puisque tous les deux nécessitent la validité de la loi de Gauss Éq. (18) (due à la bipartitité du réseau).

V.2. Phase coulombienne, liquide de spin et théorie de jauge $U(1)$

Résumons ce que nous venons d'apprendre. En décrivant un modèle microscopique de dimères sur le réseau cubique simple, nous nous sommes aperçus que la compacité du pavage de dimères et la contrainte de cœur dur Éq. (18), associées à un *ansatz* sur l'entropie de ces pavages (Éq. (19) et Éq. (21)) se traduit par une théorie de jauge simple (de type magnétostatique) qui permet de reproduire avec précision la physique à longue distance de ces pavages de dimères. Qu'y-a-t-il de générique dans ce résultat et pouvons-nous le relier à d'autres systèmes physiques connus ? Nous allons tout d'abord regarder du côté de la matière condensée « traditionnelle », puis nous nous placerons ensuite du côté de la physique des hautes énergies (théories de jauge et électrodynamique quantique).

Phase coulombienne et matière condensée

- **Liquide de spins**

La même physique apparaît tout naturellement dans d'autres systèmes de mécanique statistique à contraintes, par exemple les modèles antiferromagnétiques (Ising ou Heisenberg) sur le réseau pyrochlore [HENLEY05, ISAKOV04, HERMELE04]. La contrainte vient d'ici de la nature de ce réseau à coins partagés et de la nature antiferromagnétique des interactions, qui font que l'énergie est minimisée si le spin de chaque tétraèdre est nul. Cela peut alors se traduire par une condition de divergence nulle pour un champ vectoriel positionné sur le réseau dual, qui est bipartite (réseau diamant). On retrouve les mêmes ingrédients que pour les pavages de dimères et, en effet, les corrélations spin-spin sont bien dipolaires. Le système n'est pas ordonné magnétiquement (le facteur de structure pour des corrélations dipolaires ne diverge pas), c'est un liquide de spins. La symétrie du champ de jauge associé nous fait alors appeler cette phase *liquide de spins* $U(1)$. Bien entendu, nos dimères ne représentent pas vraiment des variables de spin, mais par abus de langage, on admet volontiers que « Phase Coulombienne » \sim « Liquide de spins $U(1)$ ». L'étude des liquides de spins constitue un pan entier du magnétisme classique et quantique (voir par exemple les revues Réfs. [MISGUICH09, BALENTS10]), et nous pouvons importer directement certains des résultats de ces études à notre problème de dimères. Par ailleurs, et ceci est une motivation particulièrement importante, les concepts théoriques peuvent être testés expérimentalement dans

certaines composés liquides de spins, comme la glace de spin (*spin ice*), où la phase Coulombienne peut être observée expérimentalement [FENNELL09].

- Superfluide

Une autre analogie utile provient cette fois-ci de l'étude de modèles bosoniques en interaction en (2+1)d (à température nulle). En faisant une approximation « de phase » du modèle de Hubbard pour des bosons, on aboutit après plusieurs transformations à un modèle de « courants » de liens décrit par la fonction de partition suivante :

$$Z = \sum_{\nabla \cdot \mathbf{J}=0} \exp\left(-\frac{1}{2K} \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{J}_{\mathbf{r}}^2\right), \tag{24}$$

où $\mathbf{J} = (J^x, J^y, J^z)$ est un vecteur à trois composantes entières $J^\alpha = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ vivant sur les liens du réseau. Ces composantes représentent physiquement les courants de bosons sur ces liens (une valeur de $J^x = +1$ indique qu'un boson a sauté d'un site à son voisin le plus proche le long de l'axe des x). La condition de divergence nulle indique la conservation du nombre de bosons. La constante de couplage K varie approximativement comme t/U dans le modèle de Hubbard bosonique. À grand K , le système est superfluide (les J fluctuent beaucoup) et à faible K , il forme un isolant de Mott (les J valent tous typiquement 0). Si l'on oubliait la nature discrète des variables de lien J , on aurait exactement la théorie électromagnétique précédemment décrite. Cette nature discrète prend en fait toute son importance quand J est typiquement petit, c'est-à-dire pour K faible : c'est en effet la discrétisation des J qui permet de comprendre la transition vers la phase isolant de Mott. Par contre, dès que J fluctue raisonnablement, la discrétisation change peu de choses : c'est le cas pour K grand, dans la phase superfluide des bosons. Écrit grossièrement, nous avons « Phase Coulombienne » \sim « Superfluide ».

Cela peut se voir sur le modèle de liens, en calculant par exemple la fonction de corrélation liens-liens $\langle J^\alpha(0)J^\beta(\mathbf{r}) \rangle$ dans la phase superfluide : on retrouve bien les lois dipolaires (voir Fig. 34). À noter que cette fonction de corrélation n'avait jamais été calculée dans le cadre du modèle de courants de liens, essentiellement car elle correspond à une observable peu

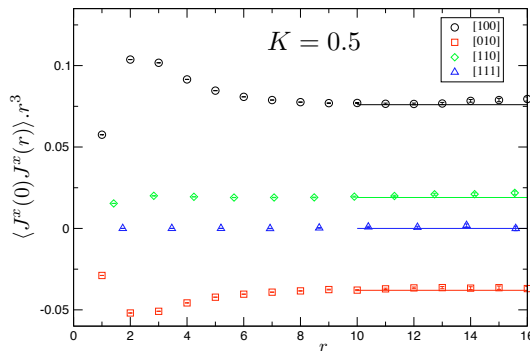


Fig. 34 Fonction de corrélation $\langle J^x(\mathbf{0})J^x(\mathbf{r}) \rangle$ (multipliée par r^3) en fonction de la distance r pour le modèle courant de liens Éq. (24) à $K = 0.5$. Sont représentés dans 4 directions différentes correspondant à différentes valeurs de l'angle Θ entre \mathbf{e}_x et \mathbf{r} .

regardée (la fonction de corrélation courant-courant) dans le modèle de bosons. Une observable plus sensible pour les bosons est bien sûr la densité superfluide ρ_s , qui s'exprime en termes des variables de liens comme $\rho_s = \frac{1}{3L^3} \sum_{\alpha} \langle (\sum_{\mathbf{r}} J_{\mathbf{r}}^{\alpha})^2 \rangle$. C'est plus généralement une variante de la relation célèbre $\rho_s \sim \langle W^2 \rangle$, où W est le nombre de winding des *worldlines* de bosons dans la simulation, dérivée dans le cadre de simulations Monte Carlo quantique par POLLOCK et CEPERLEY [POLLOCK87]. On reconnaît immédiatement dans le cadre des dimères la relation Éq. (23). ρ_s peut ainsi être calculée numériquement, mais l'on se doute bien sûr, au regard de l'Éq. (24), que $\rho_s \sim K$ au cœur de la phase superfluide (ce qui est vérifié numériquement). À noter que pour des raisons historiques de notation, K figure au dénominateur (et non pas au numérateur) dans l'Éq. (24) et joue donc le rôle inverse de K pour les dimères !

- Ferromagnétique XY

La reconnaissance de la phase superfluide pour des bosons comme une phase coulombienne (dans les bonnes variables) nous invite bien sûr à considérer les spins XY, les cousins des bosons. Une série bien documentée [WALLIN94] de transformations (multiplicateur de Lagrange, sommation de Poisson et approximation de Villain) permet de passer de l'Éq. (24) au modèle $O(2)$ pour des spins en 3 dimensions

Éq. (25)

$$Z = \sum \prod_i d\theta_i \exp \left[-J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \right]$$

où $\theta_i \in [0, 2\pi]$ est la variable de spin XY. Ici, l'échange entre les spins J est proportionnel à la constante de couplage K du modèle de courant de liens. Nous retrouvons à faible J , la phase paramagnétique haute température du modèle $O(2)$, qui correspond bien à la phase isolante du modèle de bosons à faible K . À fort J , nous avons la phase ordonnée ferromagnétiquement du modèle de spins, qui correspond à la phase superfluide du modèle bosonique. Nous devinons donc une nouvelle équivalence « Phase Coulombienne » \sim « Phase Ferromagnétique $O(2)$ ». Notons que l'on peut retrouver cette équivalence plus directement par une série de transformations approchées [DASGUPTA81] qui permettent de passer de l'Éq. (19) à l'Éq. (25) : ces transformations sont similaires à celles développées dans l'annexe B de la Réf. [ALET06B].

- Analogies et différences

Les analogies entre ces différentes phases sont particulièrement utiles pour comprendre la physique de la phase coulombienne en d'autres termes. Ainsi nous avons vu que « Fluctuations de flux » \sim « Densité superfluide ». Ces analogies vont nous guider pour comprendre comment sortir de cette phase Coulombienne. Elles s'avèrent aussi intéressantes d'un point de vue numérique, car on peut aller piocher les idées pour construire des algorithmes efficaces en s'inspirant des algorithmes déjà existants pour ces autres modèles.

D'un point de vue formel, qu'en est-il exactement des symétries dans ces diverses phases ? La phase Coulombienne possède (dans la théorie continue) une symétrie $U(1)$ *non brisée*. *A contrario*, on s'attend à des symétries brisées $U(1)$ pour une phase superfluide, et $O(2) \simeq U(1)$ pour la phase ferromagnétique du modèle XY. Tout d'abord, remarquons que le modèle de courants de lien qui nous a servi dans l'analogie de la Sec. V.2.1.2 ne possède *pas* de symétrie continue $U(1)$ directement visible, celle-ci est contenue dans la condition de

divergence nulle des variables duales de liens J . Comme annoncé, c'est le caractère discret des J qui assure la transition de Mott (sans cela, le modèle resterait superfluide sans brisure de symétrie). L'apparente symétrie $O(2)$ du modèle de spins est quant à elle restaurée dans la transformation (inverse) de Villain qui a permis d'obtenir l'Éq. (25). Comme souvent dans les transformations de dualité, les brisures de symétrie n'apparaissent pas systématiquement dans les variables directes.

Plus fondamentalement, les trois phases en questions se comportent essentiellement de la même manière, à condition de regarder les bonnes variables. En effet, et bien que ces deux notions soient en fait différentes, la brisure de symétrie souvent invoquée pour un superfluide correspond à un ordre *hors diagonal*. Celui-ci est caractérisé par un paramètre d'ordre $\langle b \rangle \neq 0$ (où b est l'opérateur d'annihilation d'un boson) ou bien, de façon équivalente, par une limite non nulle pour la fonction de corrélation hors diagonale $\langle b_0^\dagger b_r \rangle$ lorsque la distance $r \rightarrow \infty$. À strictement parler, cette fonction de corrélation hors diagonale et ce paramètre d'ordre ne sont *pas définis* dans la modèle de dimères pur car c'est un modèle classique (sans opérateur hors diagonal) : la brisure de la symétrie $U(1)$ n'est donc pas sondable directement. Par contre, si nous étendons le modèle en incluant des monomères comme nous le ferons dans la Sec. V.2.2.3, alors le corrélateur monomère-monomère $\langle m(\mathbf{0})m(\mathbf{r}) \rangle$ sera équivalent à la fonction de corrélation $\langle b_0^\dagger b_r \rangle$ - et l'analogie entre la phase superfluide et Coulombienne sera complétée. On comprend aussi que le paramètre d'ordre $\langle b \rangle \neq 0$ ne peut être sondé dans le modèle de dimères, car cela reviendrait à inclure un seul monomère dans un pavage fini de dimères, ce qui n'est pas possible. Par contre, et tout comme dans les simulations de modèles bosoniques, le calcul de la densité superfluide (*i.e.* les fluctuations de flux) est aisé bien que la superfluidité et condensation de Bose (caractérisé par le paramètre d'ordre $\langle b \rangle \neq 0$) soient deux notions différentes à strictement parler.

Pour compléter l'analogie entre phase Coulombienne et celles superfluide et ferromagnétique, nous nous attendons à des excitations *sans masse* pour la phase de Coulomb, connaissant l'existence des phonons pour le superfluide et des ondes de spins pour un ferromagnétique. Ce sont bien sûr les photons, parfois qualifiés d'*émergents* car ils ne sont pas inclus dans le modèle de dimères de départ. Dans la prochaine section, nous allons préciser les excitations possibles de la phase Coulombienne en la regardant comme une théorie de jauge.

Électrodynamique quantique et théorie de jauge

Notons immédiatement que les résultats de l'électrodynamique quantique ne peuvent s'appliquer directement, puisqu'il s'agit d'un modèle classique *sans dynamique* (pas de dimensions de temps). L'analogie partielle avec l'électrodynamique est toutefois utile, car la nature des excitations et de la stabilité de la phase Coulombienne vont apparaître clairement. Remarquons aussi que puisqu'il n'y a pas de charges électriques, nous sommes en face d'une théorie de jauge « pure » : l'énergie libre Éq. (19) (conjuguée à l'Éq. (18)) est semblable à celle générée par un Lagrangien électromagnétique $\mathcal{L} = -1/4 F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}$ avec $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ le tenseur électromagnétique. Nous sommes dans un modèle en $d=3$, et avons simplement gardé la seule composante magnétique du champ électromagnétique en écrivant \mathbf{B}^2 et $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. La symétrie du champ de jauge indique que nous avons affaire à une théorie de jauge $U(1)$.

- **Stabilité et excitations de la phase Coulombienne**

L'invariance de jauge associée pose des fortes contraintes sur des termes supplémentaires

que l'on pourrait ajouter à l'Éq. (19) : ceux-ci doivent être invariants de jauge (c.-à-d. résister à la transformation de jauge $A_\mu \rightarrow A_\mu + \partial_\mu \phi(\mathbf{r})$ où $\phi(\mathbf{r})$ est une fonction quelconque). Cela exclue donc un terme de masse, de type $m^2 A_\mu A^\mu$. Plus généralement, l'invariance de jauge (lorsqu'elle est présente) nous assure que la phase de Coulomb est stable par rapport à des perturbations faibles : en particulier, si l'on perturbe le modèle de dimères en ajoutant un peu d'interaction entre dimères (comme nous allons bien entendu le faire plus tard), on s'attend à ce que rien ne se passe, si ce n'est une renormalisation des paramètres de la théorie dans le continu. Ainsi, les termes en \mathbf{B}^4 sont non pertinents. Ceci est en contraste notable avec le cas bidimensionnel où les termes de vertex de type $V \cos(2\pi ph)$ peuvent immédiatement déstabiliser la phase critique de modèles de dimères en 2d. Bien sûr, si la perturbation est trop forte, nous pourrions déstabiliser la phase Coulombienne. De même, en rajoutant même de façon infinitésimale des effets non perturbatifs (de type instantons), la phase peut ne plus être protégée et cet argument ne nous sera alors plus utile. Cela sera le cas par exemple en autorisant l'existence de défauts (monomères) à la contrainte de cœur dur. Nous reviendrons sur ce point plus bas.

Une théorie de jauge pure comme l'Éq. (19) admet comme excitations des *photons*, qui sont interprétés ici comme des fluctuations du champ de dimères. L'absence de terme de masse en $m^2 \mathbf{A}^2$ nous indique que cette excitation est sans masse. Cela aussi nous permet de clarifier la différence au sujet des brisures de symétrie entre les différentes phases évoquées précédemment. En effet, le photon est un boson *de jauge*, et non pas *de Goldstone* (contrairement aux phonons du superfluide ou aux ondes de spin du ferromagnétique) : il n'est pas associé à une brisure de symétrie. Contrairement à ses cousines superfluides et $O(2)$, la phase Coulombienne ne brise donc pas de symétrie.

Où se trouve le photon dans notre modèle de dimères ? Il est important à ce stade de se rappeler que nous parlons d'un modèle classique, et donc *sans dynamique*. Nous ne pouvons donc pas accéder à une telle excitation. Par contre, dès qu'on ajoute une dynamique quantique telle que dans un modèle de dimères quantiques, le photon va apparaître (*émerger*) dans le spectre (sans *gap*) du modèle quantique. Le photon peut aussi émerger si l'on dote le modèle classique d'une dynamique déterministe qui doit toutefois rester assez simple, notamment locale, si l'on veut s'assurer qu'elle ne détruise pas la phase de Coulomb. Les deux approches (rajout de dynamiques quantique ou classique) sont parfois équivalentes, comme l'a montré HENLEY [HENLEY97] pour les points Rokhsar-Kivelson [ROKHSAR88] où la dynamique quantique est reproduite par une dynamique Monte Carlo entièrement classique.

- Mécanismes non perturbatifs et instantons

Malgré la stabilité énoncée et observée de la phase Coulombienne, un résultat célèbre de théorie des jagues dû à POLYAKOV indique que les effets non perturbatifs déstabilisent les théories de jauge $U(1)$ en trois dimensions – (2+1)d ou (3+0)d comme dans notre cas classique – et qu'en conséquence, il ne devrait pas y avoir de phase Coulombienne dans notre modèle de dimères ! Comment expliquer cette contradiction ?

L'argumentation de POLYAKOV est décrite dans le chapitre 4.3 de la Réf. [POLYAKOV87]. Repré-
 nons brièvement ses conclusions. Pour aboutir à une énergie libre « Maxwellienne » comme l'Éq. (18) dans le continu, on peut imaginer deux versions sur le réseau. La première est compacte, $F \sim \sum_{\mathbf{r}} (1 - \cos(\mathbf{B}_{\mathbf{r}}))$ où $\mathbf{B}_{\mathbf{r}}$ est le rotationnel sur le réseau de $\mathbf{A}_{\mathbf{r}\mu} \in [-\pi, \pi]$. Le champ de jauge est compact, de période 2π . La seconde option est plus littérale, et considère directement $F \sim \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{B}_{\mathbf{r}}^2$ avec cette fois ci $\mathbf{A}_{\mathbf{r}\mu} \in]-\infty, \infty[$ (champ de jauge non com-

fact). Ces deux énergies libres ont la même limite continue Éq. (18), mais ont une physique totalement différente.

En électrodynamique quantique, on choisit traditionnellement la version compacte de cette théorie : ceci est une conséquence de la quantification de la charge électrique. Dans ce cas compact, le champ de jauge peut admettre en trois dimensions des défauts topologiques ponctuels, où le champ de jauge varie soudainement de 2π . Ces défauts sont interprétés comme des monopoles magnétiques (*instantons*). Ces charges magnétiques interagissent à longue portée, avec une interaction coulombienne ($1/r$ en 3d), et vont désordonner le système en trois dimensions en lui donnant une longueur de corrélation finie [POLYAKOV87]. Cela se manifeste notamment dans les fonctions de corrélations du champ, qui prennent une valeur $\langle \mathbf{B}^\alpha(\mathbf{0})\mathbf{B}^\beta(\mathbf{r}) \rangle^c \sim \exp(-r/\xi)$ (avec $\xi \sim \rho_m^{-1}$ où ρ_m est la densité des monopoles magnétiques), lorsque l'on tient compte explicitement de la contribution des instantons à la fonction de partition. Les défauts topologiques prolifèrent (exactement comme dans la phase haute température du modèle XY en deux dimensions), le champ de jauge est massif et la phase de Coulomb détruite. Ce phénomène arrive pour toute densité finie de monopoles magnétiques en 3d, et quelle que soit la constante de couplage dans l'énergie libre Maxwellienne. À noter qu'en 4d, cet effet non perturbatif se manifeste pour une valeur critique de la constante de couplage. Dans le cas non compact par contre, il n'y a pas d'instantons et le phase de Coulomb est *stable* en 3d.

Qu'en est-il dans notre cas ? Il ne faut pas oublier que l'Éq. (18) n'est qu'une énergie libre *effective* pour un modèle de dimères qui est *déjà* sur le réseau : nous n'avons pas la liberté de choisir notre implémentation sur le réseau. Un simple rappel de la nature du caractère complet des pavages de dimères nous indique que nous avons affaire à une théorie de jauge non compacte : il n'y a pas de défauts topologiques sur le réseau. La phase Coulombienne est donc sauvée.

- **Monomères, confinement et déconfinement**

Le lecteur de la partie précédente sur les dimères en deux dimensions comprendra aisément que le rôle des monopoles magnétiques est joué par les *monomères*, absents par définition du modèle. Bien que cela n'ait jamais été vérifié directement (voir toutefois des preuves indirectes dans la Réf. [SREEJITH14]), il est clair avec l'argument de POLYAKOV que l'introduction d'une densité finie de monomères dans le pavage de dimères va immédiatement déstabiliser la phase Coulombienne pour résulter en un simple liquide dimères-monomères, comme dans le cas bidimensionnel dopé. L'absence des défauts topologiques est fondamental à l'existence d'une phase Coulombienne : ainsi, il a été montré [MOTRUNICH04] que le modèle classique $O(3)$ possède aussi une phase Coulombienne à haute température (en place de la phase paramagnétique standard) dès qu'on enlève ces défauts topologiques de la fonction de partition.

La phase de Coulomb est aussi détruite lorsque l'on place les dimères sur un réseau non bipartite. Cela a été vérifié numériquement pour le réseau cubique fcc [HUSE03], avec des corrélations dimère-dimère décroissant exponentiellement avec une longueur de corrélation finie. Contrairement au cas bidimensionnel, ceci reste vrai quelque soit la constante de couplage K dans Éq. (18) : il n'y aura donc pas moyen (comme nous l'avions fait dans la Sec. IV.5) de jouer sur cette constante pour trouver une phase Coulombienne sur un réseau non bipartite en 3d.

L'argument de POLYAKOV nous permet d'aller plus loin, et nous fournit une occasion de

comprendre comment mieux caractériser la phase de Coulomb. Introduisons dans le pavage de dimères, non pas une densité finie, mais simplement deux monomères tests. Les deux monomères vivent nécessairement sur deux sous-réseaux différents et nous pouvons calculer la fonction de corrélation monomère-monomère $\langle m(\mathbf{0})m(\mathbf{r}) \rangle$ comme précédemment. L'interaction effective entre ces deux charges magnétiques est $V(\mathbf{r}) \sim 1/|\mathbf{r}|$. On s'attend donc à un corrélateur $\langle m(\mathbf{0})m(\mathbf{r}) \rangle \sim \exp(V(\mathbf{r})) \sim \exp(1/|\mathbf{r}|)$, qui tend vers une constante pour $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. En d'autres termes, deux monomères tests sont *déconfinés* dans la phase de Coulomb, puisqu'il existe une probabilité finie de les trouver séparés à distance arbitraire. Ceci se vérifie très aisément en calculant numériquement $\langle m(\mathbf{0})m(\mathbf{r}) \rangle$: on observe sur la Fig. 35, qu'après une distance $|\mathbf{r}| \sim 20$, le corrélateur tend vers une constante et les deux monomères tests sont bien déconfinés. Pour déterminer numériquement l'interaction effective entre monomères, il faut regarder le comportement à grande distance de $\ln\langle m(\mathbf{0})m(\mathbf{r}) \rangle$: comme le montre l'encart de la Fig. 35, une forme en $A + B/r$ reproduit très raisonnablement les données numériques, justifiant l'analyse. À noter toutefois qu'un fit libre en $A + B/r^\alpha$ donne des valeurs d'exposant α entre 1 et 1.5 (selon la gamme de valeurs de r prise en compte dans le fit).

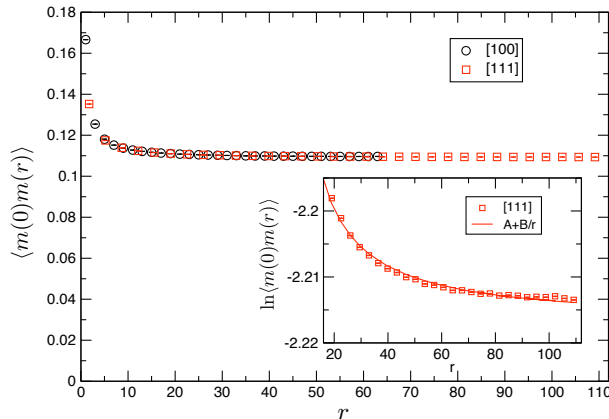


Fig. 35 Corrélation $\langle m(\mathbf{0})m(\mathbf{r}) \rangle$ en fonction de la séparation r entre les deux monomères, pour les deux directions [100] et [111]. L'encart montre le logarithme de ce corrélateur en fonction de r et le résultat d'un fit par une interaction effective Coulombienne $A + B/r$.

Finalement, notons que si l'on introduit un seul monomère dans un pavage de dimères, une ligne de défaut de champ magnétique va se créer dans et se propager jusqu'à l'infini (ou au moins jusqu'au bord de l'échantillon) : c'est tout simplement la corde de Dirac (*Dirac string*), qui sort d'un monopole magnétique. À noter que c'est le même type d'argument qui a été utilisé pour motiver la recherche de monopoles magnétiques dans la glace de spin [CASTELNOVO08]. La découverte de ces monopoles [BRAMWELL09,MORRIS09,KADOWAKI09] dans ces composés frustrés a reçu beaucoup d'attention [SONDHI09,GINGRAS09] (voir Réf. [JAUBERT11] pour une revue).

Il peut être utile de préciser le langage fréquemment utilisé en électrodynamique quantique. On parle de phase déconfinée, lorsque les charges *électriques* sont libres (déconfinées). Par dualité, les charges magnétiques (monopoles magnétiques) sont elles confinées. La phase Coulombienne est une phase déconfinée au sens habituel de l'électrodynamique quantique : si l'on

rajoutait des charges électriques, elles seraient déconfinées. Encore faudrait-il être capable de préciser quel degré de liberté tiendrait le rôle d'une charge électrique dans notre modèle de dimères *classiques* en 3d. Dans le cadre des modèles de dimères quantiques qui admettent eux aussi des phases Coulombiennes en (3+1)d, le rôle des charges électriques est joué par les spinons (spins libres non appariés en dimères). Les charges magnétiques sont mieux identifiées dans notre modèle de dimères classiques : ce sont les monomères. Par dualité, nous savons que si l'on introduisait une densité *finie* de monomères dans notre modèle, ils seraient confinés (alors que deux monomères *tests* sont déconfinés). Malheureusement, par l'argument de POLYAKOV, la phase Coulombienne serait immédiatement détruite en 3d, et l'on obtiendrait une phase confinante (avec prolifération des monomères et confinement des charges électriques).

- **Boucles de Wilson et loi du périmètre**

Les théories de jauge nous offrent aussi une autre façon de caractériser la phase Coulombienne. Il s'agit de la boucle de Wilson, définie sur un contour fermé \mathcal{C} :

$$W_{\mathcal{C}} = \left\langle \oint_{\mathcal{C}} \exp(i \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}) \right\rangle.$$

Les boucles de Wilson sont des objets fondamentaux des théories de jauge. Elles sont invariantes de jauge et leur variation en fonction de la taille de la boucle \mathcal{C} permet de distinguer la nature de la phase physique. Pour des phases déconfinées, on s'attend à une *loi du périmètre*, où la boucle de Wilson varie comme $W_{\mathcal{C}} \sim \exp(-aL)$, où L est la taille linéaire (le périmètre) de la courbe \mathcal{C} (et a une constante non pertinente). Par contre, dans une phase confinée, on s'attend à une *loi des aires*, avec $W_{\mathcal{C}} \sim \exp(-aL^2)$.

Comment utiliser les boucles de Wilson dans le modèle de dimères ? Il suffit de ré-écrire :

$$W_{\mathcal{C}} = \left\langle \iint_{\Sigma} \exp(i \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}) \right\rangle,$$

et le flux élémentaire $\mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}$ a une interprétation physique simple : il s'agit du nombre (algébrique) de dimères qui traversent l'élément de surface dS . On a simplement $W_{\mathcal{C}} = \left\langle \int_{\Sigma} \exp(i \Phi_{\Sigma}) \right\rangle$, où Σ est la surface sous-tendue par \mathcal{C} .

Un argument simple dû à G. MISGUICH permet de retrouver le comportement de la loi des aires/du périmètre directement en termes du modèle de dimères. Partons de la vision des monomères comme des charges magnétiques, sources ou puits du champ magnétique suivant le sous-réseau dans lequel ils se trouvent. Les monomères arrivant par paires dans le réseau de dimères, considérons maintenant le flux magnétique à travers une surface Σ dû aux lignes de champ générées par cet ensemble de paires. Dans une phase confinée, les monomères sont libres et les deux monomères d'une paire sont typiquement assez éloignés l'un de l'autre. En conséquence, les lignes de champ peuvent créer un flux magnétique sur l'ensemble de la surface Σ (Fig. 36a) : on a alors une loi des aires. Par contre, dans une phase déconfinée telle que la phase Coulombienne, les monomères sont très proches, et le flux algébrique généré par une paire de monomères est statistiquement nul. Seuls les monomères proches des bords de la boucle \mathcal{C} peuvent produire un flux magnétique non nul (Fig. 36b) : c'est la loi du périmètre.

Nous avons calculé la boucle de Wilson pour différentes tailles de courbe \mathcal{C} , prise comme

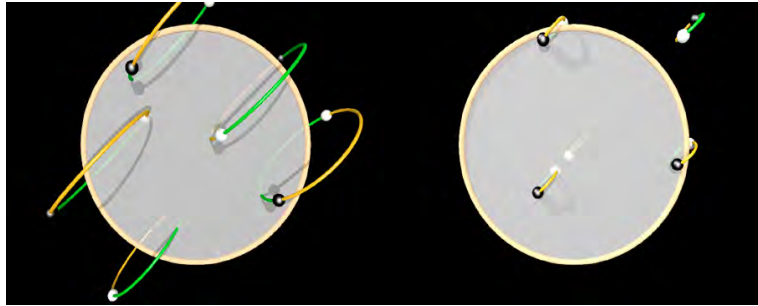


Fig. 36 Illustration d'un flux magnétique traversant une surface donnée sous-tendue par une boucle de Wilson. À gauche : loi des aires. Lorsque les monomères sont déconfinés, les lignes de champ magnétiques (ici illustrées en couleur) sont suffisamment écartées pour que leur contribution nette au flux soit répartie sur toute la surface. À droite : les monomères confinés sont trop proches pour contribuer au flux : en moyenne le flux s'annule. Seuls les monomères proches du bord de la courbe peuvent contribuer : c'est la loi du périmètre.

un carré de taille linéaire ℓ (voir encart de la Fig. 37). Dans la phase Coulombienne, on retrouve avec une précision raisonnable¹¹ la loi du périmètre attendue (mise en exergue par l'échelle semi-log de la Fig. 37), avec des effets de taille finie dès que la taille de la boucle ℓ s'approche de la taille linéaire de l'échantillon L .

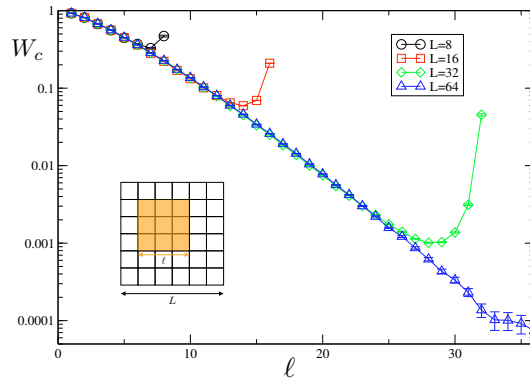


Fig. 37 Dépendance en taille ℓ pour la boucle de Wilson W_c pour une courbe c carrée de taille linéaire ℓ dans un échantillon de taille linéaire L (géométrie présentée dans l'encart). Le comportement approximativement linéaire dans une région $1 \ll \ell \lesssim L/2$ en échelle semi-log correspond à une loi du périmètre pour la boucle de Wilson.

• Sortir de la phase Coulombienne

Peut-il y avoir une transition de phase pour sortir de la phase Coulombienne, et si oui, vers quelles phases peut-on se diriger ? Le théorème d'Elitzur [ELITZUR75] nous indique qu'en présence d'invariance locale de jauge, il ne peut pas y avoir de brisure de symétrie locale au sens strict. Seules les quantités invariantes de jauge peuvent acquérir une valeur moyenne non nulle. Ce théorème n'est pas trop restrictif en fait. Certes, il indique qu'on ne peut pas écrire un paramètre d'ordre pour une des phases concernées, mais il est toujours possible de distinguer deux phases (invariantes de jauge) par le comportement différent de fonc-

¹¹ Un fit libre en $W_c \propto \exp(-c\ell^\omega)$ pour $1 \ll \ell \lesssim L/2$ donne $\omega \simeq 1.18$, proche de l'unité

tions de corrélations invariantes de jauge [POLYAKOV87]. C'est en fait similaire au cas de la transition de phase KT du modèle XY en 2d, où il n'y a pas de brisure de symétrie. L'autre possibilité est indirecte : on brise d'abord spontanément une symétrie globale, ce qui peut être vu comme un choix de jauge, et le théorème d'Elitzur ne s'applique plus. C'est le cas du célèbre mécanisme de Higgs-Anderson [ANDERSON63,HIGGS64], qui permet aux bosons de jauge de devenir massifs. Nous reviendrons sur ce mécanisme comme explication de la transition de phase en jeu décrite dans le Chapitre VI.

Digression sur le cas bidimensionnel

Effectuons une digression sur la consistance de l'analogie coulombienne avec les résultats présentés dans la partie précédente sur le cas de pavages bidimensionnels. Dans la transformation de la Sec. V.1.2, la dimension n'intervient qu'à travers z , et nous aurions pu jouer au même jeu en 2d. C'est tout à fait correct, et en deux dimensions les choses se simplifient : on a $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \nabla \times (0, 0, h(\mathbf{r}))$. Il est bien connu qu'en 2d, le potentiel vecteur \mathbf{A} devient scalaire, qui se trouve précisément être le champ de hauteur $h(\mathbf{r})$ défini dans la partie précédente. Le rotationnel de \mathbf{A} devient un gradient, et le terme \mathbf{B}^2 dans l'énergie libre effective devient $|\nabla h|^2$, un des deux termes de l'action effective en deux dimensions. L'autre terme de vertex en $V \cos(2\pi p h)$ qui existe en 2d est non pertinent en 3d.

Chapitre VI. Étude Monte Carlo de la transition Coulomb-cristal

Dans ce chapitre, nous introduisons un modèle de dimères en interactions en trois dimensions, et étudions la transition de phase que celui-ci présente à l'aide de l'algorithme Monte Carlo de ver. Étant donnée la nature inhabituelle de la transition, nous présentons un maximum de résultats numériques les plus précis possibles, comme autant d'indices pour comprendre la physique en jeu. Les résultats de ce chapitre ont été présentés dans les Réfs. [ALET06] et [MISGUICH08].

Comme dans le cas du modèle bidimensionnel, nous favoriserons l'alignement de deux dimères sur les *plaquettes* du réseau cubique. Le modèle introduit dans la Réf. [ALET06] donne une énergie

$$\text{Éq. (26)} \quad E_c = v \left[N^c \left(\begin{array}{c} \overline{1} \overline{1} \overline{1} \\ \overline{1} \overline{1} \overline{1} \\ \overline{1} \overline{1} \overline{1} \end{array} \right) + N^c \left(\begin{array}{c} \overline{1} \overline{1} \overline{1} \\ \overline{1} \overline{1} \overline{1} \\ \overline{1} \overline{1} \overline{1} \end{array} \right) + N^c \left(\begin{array}{c} \overline{1} \overline{1} \overline{1} \\ \overline{1} \overline{1} \overline{1} \\ \overline{1} \overline{1} \overline{1} \end{array} \right) + N^c \left(\begin{array}{c} \overline{1} \overline{1} \overline{1} \\ \overline{1} \overline{1} \overline{1} \\ \overline{1} \overline{1} \overline{1} \end{array} \right) + N^c \left(\begin{array}{c} \overline{1} \overline{1} \overline{1} \\ \overline{1} \overline{1} \overline{1} \\ \overline{1} \overline{1} \overline{1} \end{array} \right) + N^c \left(\begin{array}{c} \overline{1} \overline{1} \overline{1} \\ \overline{1} \overline{1} \overline{1} \\ \overline{1} \overline{1} \overline{1} \end{array} \right) \right]$$

à chaque configuration c , où le terme entre crochets compte le nombre de plaquettes avec deux dimères parallèles dans les trois directions possibles. L'interaction choisie respecte toutes les symétries du cube, c.-à-d. toutes les plaquettes possibles du réseau (soit 6 par sites) peuvent contenir une paire de dimères parallèles dans deux positions non équivalentes possibles. Ce modèle est illustré dans la Fig. 38.

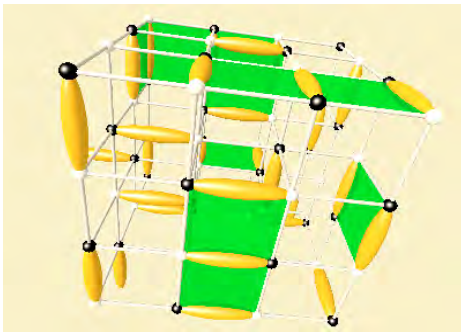


Fig. 38 Illustration du modèle de dimères en interactions sur le réseau cubique. Chaque plaquette colorée en vert possède deux dimères parallèles et contribue $+v$ à l'énergie.

Nous allons encore une fois nous concentrer sur le cas d'interactions alignantes $v = -1$, pour lequel l'énergie est minimisée par les six fondamentaux colonnaires de la Fig. 39.

Comme son équivalent en deux dimensions Éq. (2), le modèle Éq. (26) possède donc deux limites simples. À température nulle, le système est dans une phase colonnaire brisant les symétries de translation et de rotation, alors qu'à température infinie, le système se trouve dans la phase Coulombienne décrite dans le Chapitre V. Il doit donc exister (au moins) une transition de phase séparant ces deux états. C'est cette mise en ordre que nous allons étudier numériquement.



Fig. 39 Les six configurations colonnaires minimisant l'énergie Éq. (26) (pour $v < 0$).

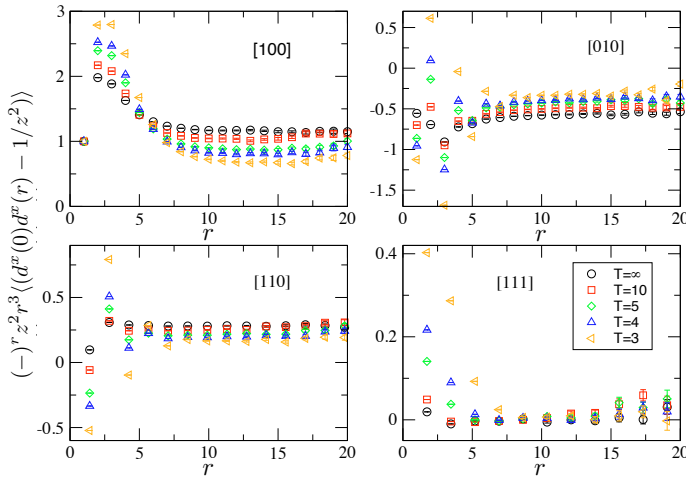


Fig. 40 Fonction de corrélation connexe $\langle d^x(\mathbf{0})d^x(\mathbf{r}) - 1/z^2 \rangle$ (multipliée par $(-)^r \cdot z^2 \cdot r^3$) entre deux dimères pointant dans la même direction séparés par \mathbf{r} , en fonction de la distance r , pour un échantillon $L=128$ pour différentes températures et dans différentes directions.

VI.1. Résultats à haute température

Stabilité de la phase Coulombienne à haute température

Commençons par regarder comment les fonctions de corrélations dipolaires, la signature typique de la phase Coulombienne présente sans interaction, évoluent en fonction de la température. Étant donnée la stabilité de cette phase prédite dans la [Sec. V.2.1.6](#), nous nous attendons à ce que ces corrélations restent dipolaires si la température reste suffisamment élevée.

C'est bien le cas observé dans la [Fig. 40](#), où au moins jusqu'à une température $T \simeq 3$ (pour la taille d'échantillon présentée), la fonction de corrélation dimère-dimère (multipliée par r^3) converge vers une constante qui dépend de l'orientation choisie. La seule différence notable dans la gamme de température présentée ici est l'amplitude des fonctions de corrélations qui diminue avec la température. Ceci peut s'expliquer très simplement par une augmentation de la constante de couplage $K(T)$ (présente dans les [Éq. \(21\)](#) et [Éq. \(19\)](#)) avec la température.

De même, nous nous attendons à ce que les monomères restent déconfinés à haute température, ce qui est clairement visible dans l'évolution en fonction de T de la fonction de corrélation monomère-monomère $\langle m(\mathbf{0})m(\mathbf{r}) \rangle$ présentée dans la [Fig. 41](#). À grande distance, la fonction de corrélation tend toujours vers une constante non nulle, nous assurant du déconfinement des monomères. Notons toutefois que la constante diminue lorsqu'on abaisse la température, indiquant que la probabilité de trouver deux monomères à une distance arbitraire devient de plus en plus faible : les monomères ont tendance à se rapprocher. À noter qu'il est possible de détecter l'existence de la phase Coulombienne jusqu'à plus basse température à l'aide du déconfinement des monomères qu'à travers les corrélations dipolaires entre dimères (voir la température minimale dans les [Fig. 40](#) et [Fig. 41](#)) : ceci sera compris dans la [Sec. VI.1.2](#).

La phase Coulombienne peut être caractérisée par la connaissance de la constante de cou-

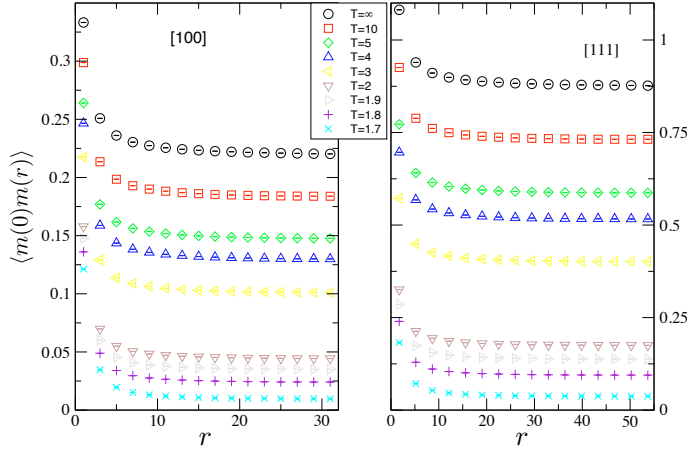


Fig. 41 Corrélation monomère-monomère $\langle m(0)m(r) \rangle$ en fonction de la séparation r entre monomères, pour deux directions [100] et [111] et températures différentes.

plage K , et les évolutions des fonctions de corrélations présentées ci-dessus sont capturées par l'évolution de $K^{-1}(T)$ en fonction de la température de la Fig. 42, pour différentes tailles de systèmes. Ces résultats ont été obtenus en mesurant les fluctuations de flux Φ dans les simulations et en utilisant l'Éq. (23). $K^{-1}(T)$ diminue avec la température, indiquant que la phase Coulombienne devient de plus en plus rigide (il devient difficile de faire passer un flux), jusqu'à disparaître pour une température de l'ordre de $T \sim 1.7$ où $K^{-1}(T)$ s'annule. Ce comportement est assez naturel puisque les interactions tendent à former un cristal colonnaire où le flux Φ est nul. Les résultats pour différentes tailles de systèmes montrent qu'à suffisamment haute température, l'estimation de K^{-1} est bien convergée alors que les effets de taille finie dans les fluctuations de flux deviennent importants lorsque l'on se rapproche de la transition. Nous étudierons en détail le scaling de K^{-1} dans la Sec. VI.3, en le caractérisant par un exposant critique.

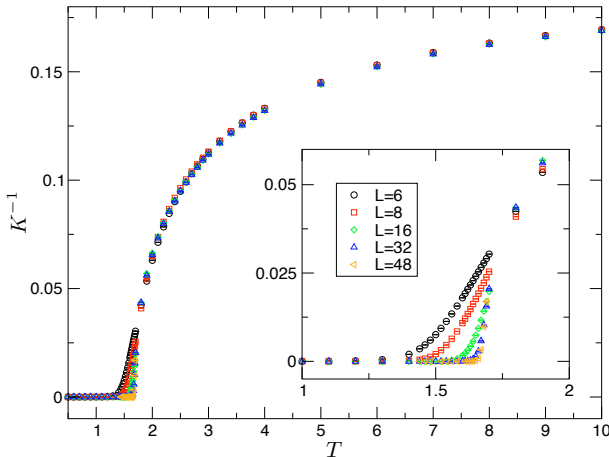


Fig. 42 Évolution de la constante de couplage K^{-1} en fonction de la température pour différentes tailles de systèmes. Encart : zoom dans la gamme de températures où K^{-1} s'annule.

Changements qualitatifs des corrélations à l'approche de la transition

Une façon complémentaire de s'apercevoir de la chute de la phase Coulombienne est le changement *qualitatif* des fonctions de corrélation dimère-dimère proche de $T \sim 1.7$ présenté dans la Fig. 43a. Les observations et calculs de cette section sont dus à G. MISGUICH. Considérons le cas $\alpha = \beta = x$ dans la fonction de corrélation Éq. (21) (les deux dimères pointent dans la même direction). Alors que dans la phase Coulombienne, les fonctions de corrélations doivent dépendre de l'orientation relative du vecteur \mathbf{r} de séparation des deux dimères par rapport à la direction \mathbf{e}_x des dimères (comme vu dans la Fig. 40), nous observons que les corrélations deviennent *isotropes* pour les températures $T = 1.675$ et $T = 1.68$ de la Fig. 43a. Il est important de remarquer que les corrélateurs ne sont *pas* multipliés par r^3 dans la Fig. 43a : clairement cet effet est non Coulombien. Pour identifier cette nouvelle contribution aux corrélations, il est utile de choisir la direction [111] car la contribution Coulombienne y devient nulle à grande distance (voir Éq. (21)). La Fig. 43b présente l'évolution des corrélations $\langle d^x(\mathbf{0})d^x(\mathbf{r}) \rangle$ dans la direction [111] en fonction de la température. Alors que celle-ci est négligeable à haute température ($T = 4$) et tend rapidement à s'annuler pour une température intermédiaire ($T = 1.8$), une contribution non Coulombienne émerge lorsque la température diminue.

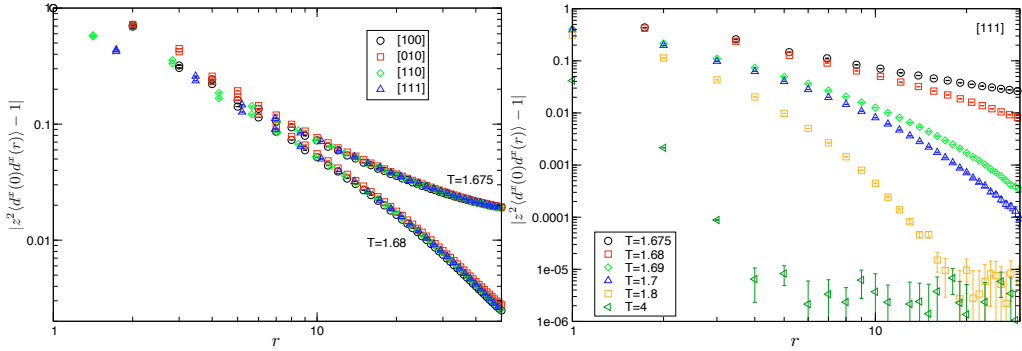


Fig. 43 Corrélations dimère-dimère $z^2|\langle d^x(\mathbf{0})d^x(\mathbf{r}) \rangle - 1/z^2|$ en fonction de r : a) pour deux températures $T=1.675$ et $T=1.68$ et différentes orientations, b) dans la direction [111] pour différentes températures dans la phase Coulombienne. Pour les deux figures, la taille linéaire de l'échantillon utilisé est $L=128$.

Cette contribution aux fonctions de corrélation est naturellement induite par la présence de la phase cristalline à basse température. Pour être plus quantitatif, il est possible de décrire les résultats numériques en rajoutant « à la main » un terme à l'Éq. (20):

$$\langle d^\alpha(\mathbf{0})d^\beta(\mathbf{r}) \rangle^c = \frac{(-)^{\mathbf{r}}}{4\pi K} \frac{3r^\alpha r^\beta - \mathbf{r}^2 \delta_{\alpha\beta}}{\mathbf{r}^5} + (-)^{r^\alpha} g(|\mathbf{r}|) \delta^{\alpha\beta}. \quad \text{Éq. (27)}$$

Les facteurs $\delta^{\alpha\beta}$ et $(-)^{r^\alpha}$ permettent de calquer la physique de l'alignement des dimères induite par les interactions et présente dans les fondamentaux de la Fig. 39. La fonction $g(|\mathbf{r}|)$ ne dépend plus que du module de \mathbf{r} puisque les effets angulaires sont capturés par les facteurs ci-dessus.

Un choix judicieux des directions α, β et de \mathbf{r} permet de valider plus avant l'Éq. (27). En effet, celle-ci permet de rendre compte des effets suivants observés numériquement. En prenant $\alpha \neq \beta$ (par exemple $\alpha = x, \beta = y$), la contribution cristalline s'annule et il ne reste que la partie dipolaire si l'on prend la direction [110]. La Fig. 44 montre cette fois-ci le comportement attendu de diminution de l'amplitude de la fonction de corrélation dimère-dimère (multipliée par r^3) jusqu'à une température aussi basse que $T = 1.68$. Cette partie dipolaire est masquée par la contribution cristalline pour $\alpha = \beta$ comme observé dans la Fig. 43b. À noter qu'à faible distance on observe toutefois un effet alterné des corrélations pour $T = 1.8$ et $T = 1.68$. Celle-ci est certainement due à une valeur non nulle de la contribution cristalline pour $\alpha \neq \beta$ pour les faibles valeurs de r qui a été négligée dans l'Éq. (27) (cette partie doit exister à l'échelle du réseau, ne serait-ce que pour refléter la nature de cœur dur des dimères).

Lorsque $\alpha = \beta$ dans la direction [111], c'est cette fois la contribution dipolaire qui s'annule et il ne reste que la contribution cristalline comme visible dans la Fig. 43b. L'échelle log-log de cette figure nous indique par ailleurs que $g(|\mathbf{r}|)$ décroît algébriquement pour une température $T = 1.675$ (pour l'échantillon de taille $L = 128$ utilisé dans le calcul), avec un exposant proche de l'unité : $g(r) \sim 1/r$. Un comportement algébrique des fonctions de corrélation est typique d'une transition du second ordre : nous allons confirmer ceci plus en détail dans la Sec. VI.3.

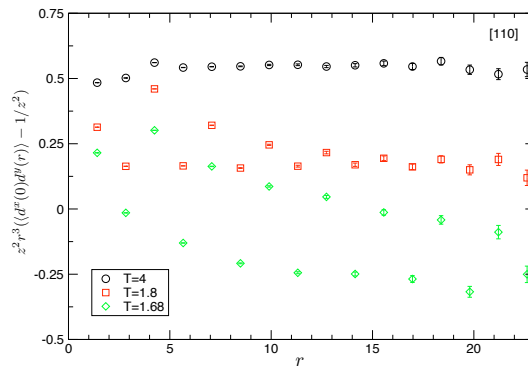


Fig. 44 Fonction de corrélation connexe $\langle d^x(\mathbf{0})d^y(\mathbf{r}) - 1/z^2 \rangle$ (multipliée par $z^2 r^3$) entre deux dimères pointant dans les direction \mathbf{e}_x et \mathbf{e}_y le long de la direction [110], en fonction de leur séparation r , pour un échantillon de taille linéaire $L=64$ et différentes températures dans la phase Coulombienne. Dans cette direction, la partie « cristalline » s'annule et on retrouve un comportement dipolaire.

Cette contribution supplémentaire aux fonctions de corrélation est très clairement liée à la phase basse température qui sera décrite plus précisément dans la Sec. VI.2. Pour mettre ceci en évidence et pour donner un premier indice d'une criticalité particulière dans le modèle de dimères, comparons les résultats des fonctions de corrélation à ceux d'un modèle similaire. Il s'agit du modèle courant de liens évoqué dans la Sec. V.2.1.2, ayant à la fois une phase de Coulomb et une phase « basse température » où les fluctuations de flux sont supprimées. Les deux phases sont séparées par une transition du second ordre (à $K_c = 0.33305$ dans les notations de l'Éq. (24)) [ALET03], qui se trouve dans la classe d'universalité du mo-

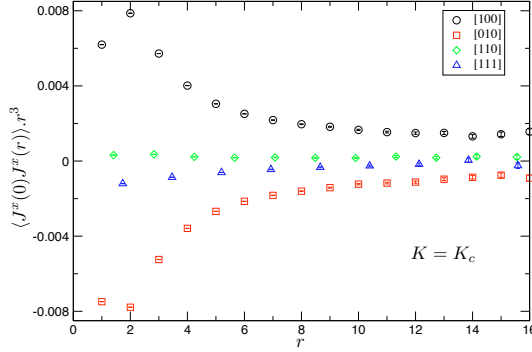


Fig. 45 Corrélations courant-courant $\langle J^\alpha(\mathbf{0})J^\beta(\mathbf{r}) \rangle$ du modèle courant de liens [Éq. (24)] au point critique $K_c = 0.33305$. La taille linéaire de l'échantillon est $L=64$.

dèle XY en trois dimensions. L'équivalent de la fonction de corrélation dimère-dimère est la fonction de corrélation courant-courant $\langle J^\alpha(\mathbf{0})J^\beta(\mathbf{r}) \rangle$. La Fig. 45 représente cette fonction de corrélation pour $\alpha = \beta$ au point K_c , et est à comparer à la Fig. 34 avec $K = 0.5$ au cœur de la phase Coulombienne. À part une renormalisation de l'amplitude des corrélations (voir axe vertical des Fig. 34 et Fig. 45), il n'y a aucune différence notable entre les données prises à $K = 0.5$ et celles à K_c . Le système reste purement Coulombien jusqu'à sa chute, en contraste notable avec le modèle de dimères. Ceci peut être expliqué par la nature de la phase basse température qui est essentiellement « plate » dans le modèle de courant de liens (à $K = 0$ tous les courants J sont nuls) et qui ne brise aucune symétrie. À noter que nous avons choisi $\alpha = \beta$ pour précisément comparer avec la Fig. 43. Nous comprenons avec cet aspect qualitatif que la mise en ordre de la phase basse température, la destruction de la phase Coulombienne et la (les) transition(s) de phase associée(s) vont être *quantitativement* différentes de la physique 3d XY du modèle de courants de liens.

Pour finir, nous notons qu'une même analyse sur la fonction de corrélation monomère-monomère révèle aussi un changement qualitatif de cette corrélation à l'approche de la transition, changement détaillé dans la Réf. [MISGUICH08].

VI.2. Phase basse température

Puisque le modèle Éq. (26) possède un spectre discret, l'ordre colonnaire présent dans les fondamentaux va subsister à température finie. Pour le caractériser et par analogie avec le paramètre d'ordre complexe du modèle bidimensionnel Éq. (3), il est utile d'introduire un paramètre d'ordre vectoriel à trois composantes

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} (-)^{r_x} [d^x(\mathbf{r}) - d^{-x}(\mathbf{r})] \\ (-)^{r_y} [d^y(\mathbf{r}) - d^{-y}(\mathbf{r})] \\ (-)^{r_z} [d^z(\mathbf{r}) - d^{-z}(\mathbf{r})] \end{pmatrix} \quad \text{Éq. (28)}$$

sur tous les sites du réseau. La somme $m = 2/L^3 |\sum_{\mathbf{r} \in A} \mathbf{m}(\mathbf{r})|$, normalisée pour valoir 1 dans un état colonnaire de la Fig. 39, va nous servir de paramètre d'ordre.

Traçons le paramètre d'ordre m en fonction de la température, pour différentes tailles de systèmes (voir Fig. 46). Il apparaît clairement que le système s'ordonne à basse température,

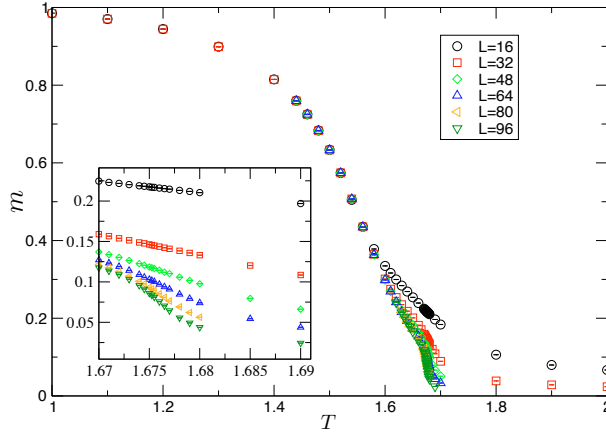


Fig. 46 Évolution du paramètre d'ordre colonnaire $m = 2|\sum_{\mathbf{r} \in A} \mathbf{m}(\mathbf{r})|/L^3$ en fonction de la température pour différentes tailles de systèmes.

et le paramètre d'ordre semble commencer à prendre des valeurs non nulles pour une température proche de $T \sim 1.7$, avec encore une fois des effets de taille finie importants dans cette région. Cette température semble proche de celle où la phase Coulombienne s'annule, suggérant un point de transition unique entre les deux phases. Pour aller plus loin, il est nécessaire de faire une analyse de taille finie poussée proche de ce point de rencontre des deux ordres, ce que nous effectuons dans la Sec. VI.3. Avant cela, remarquons que la nature relativement régulière des courbes du paramètre d'ordre proche de $T \sim 1.7$ semblent indiquer une mise en ordre colonnaire continue. La nature second ordre du point critique sera elle aussi discutée dans la Sec. VI.3.

VI.3. Transition

Comment déterminer de façon la plus précise l'existence d'une ou plusieurs transitions de phase, ainsi que leur nature ? Pour les transitions de phase continues, l'utilisation de l'analyse de taille finie (*finite size scaling*) est à la fois cruciale et pratique pour déterminer un point critique à partir de données numériques sur des échantillons finis.

Depuis la phase haute température

Commençons par l'extension de la phase Coulombienne, caractérisée par sa rigidité K^{-1} . Nous avons vu avec l'analogie avec une phase superfluide, que K^{-1} pouvait s'interpréter comme une densité superfluide ρ_s dans un modèle bosonique. Filant l'analogie, il est naturel de s'attendre à ce que K^{-1} suive la même loi d'échelle que celle dérivée pour la densité superfluide [FISHER89], pour une transition superfluide-isolant continue :

$$\text{Éq. (29)} \quad K^{-1} = L^{-1} f(|T - T_c| L^{1/\nu})$$

où L est la taille linéaire de l'échantillon, f une fonction d'échelle universelle non connue, T_c la température critique et ν l'exposant critique de la longueur de corrélation. Deux choses sont à noter. Premièrement, dans le cas général le préfacteur $1/L$ est élevé à la puissance z (exposant critique dynamique) : ici nous avons simplement $z = 1$, par isotropie du système

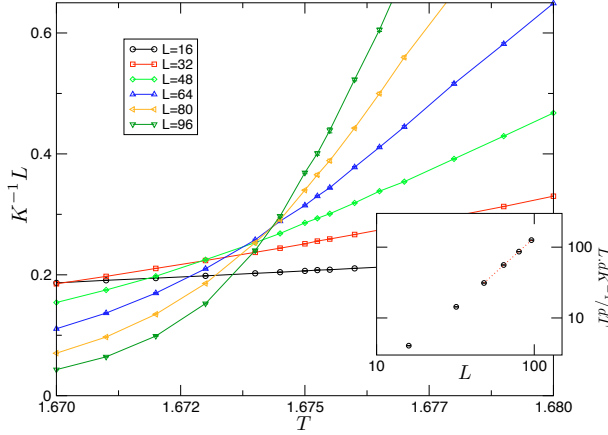


Fig. 47 Point de croisement en fonction de la température pour la quantité $K^{-1}.L$, pour différentes tailles d'échantillon. Encart : loi d'échelle suivie par la dérivée $L.dK^{-1}/dT$ au point critique T_c , en fonction de la taille du système (échelle log-log). La ligne droite indique le meilleur fit en loi de puissance pour les tailles $L \geq 48$.

dans la troisième direction, correspondant à celle du temps imaginaire dans l'analogie avec le système superfluide. Secondement, nous ne supposons pas en écrivant l'Éq. (29) que la longueur de corrélation ξ (associée à l'exposant ν par $\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$) soit associée à un ordre spécifique (par exemple à la fonction de corrélation du paramètre d'ordre colonnaire). Il s'agit simplement de l'échelle caractéristique en dessous de laquelle le système n'est plus Coulombien : pour $r \lesssim \xi(T)$, les corrélations dimère-dimère ne sont plus dipolaires. Cette échelle caractéristique ne se voit pas forcément sur les corrélations de la Fig. 43, car masquée par les contributions supplémentaires (fonction g) dues aux fluctuations cristallines colonnaires. Elle peut éventuellement être observée dans la Fig. 44 (cas $\alpha \neq \beta$ où l'on s'attend à ce que la contribution cristalline soit plus faible) : les corrélations n'atteignent en effet leurs valeurs asymptotiques que pour des distances r de plus en plus grandes à mesure que la température diminue. Il est toutefois difficile de distinguer ce qui est dû à l'augmentation de la longueur de corrélation de ce qui est provoqué par de faibles effets cristallins résiduels pour $\alpha \neq \beta$ (comme discuté dans la Sec. VI.1.2) ou d'une renormalisation de l'amplitude des corrélations due à la diminution de K^{-1} . Dans ce cadre, cette longueur de corrélation se repère certainement mieux dans le modèle de courants où il n'y a pas de fluctuations cristallines : on voit clairement dans la Fig. 45 que le régime Coulombien asymptotique est retrouvé pour des distances r bien plus grandes à K_c qu'à haute « température » $K = 0.5$. Notons que dans toutes ces analyses, la longueur de corrélation est toujours limitée par la taille finie des échantillons.

Si la transition de phase est du second ordre, l'Éq. (29) prédit qu'à $T = T_c$, la quantité $K^{-1}.L$ est une constante universelle puisqu'égalée à $f(0)$. En dehors de la région critique, on s'attend à ce que, dans la phase colonnaire gapée, K^{-1} décroisse exponentiellement vers 0 (et donc $K^{-1}.L$ aussi). Par ailleurs dans la phase Coulombienne, K^{-1} est constante, donc $K^{-1}.L$ va diverger. En pratique, nous allons tracer $K^{-1}.L$ pour différentes tailles de systèmes, et l'obtention d'un point de croisement fixe et stable de ces différentes courbes sera un signe fort en faveur d'une transition du second ordre. C'est effectivement ce que nous observons dans la Fig. 47, où les courbes pour différentes tailles se croisent clairement pour

$T = 1.675(5)$. À noter que s'il existe un petit déplacement du point de croisement pour les petites tailles de systèmes, le point de croisement est stable pour $L \geq 48$. La déviation observée pour les petites tailles est très faible (il suffit de noter l'échelle très précise de température de la Fig. 47) et est naturelle pour les petites tailles, pour lesquelles des corrections d'échelle à la loi Éq. (29) sont attendues.

Par ailleurs, la dérivation de l'Éq. (29) par rapport à T fournit la relation $L.dK^{-1}/dT = L^{1/\nu} (df/dT)|_{T=T_c}$. La dérivée $dK^{-1}.L/dT$ varie donc au point critique comme $L^{1/\nu}$ et peut être obtenue soit numériquement avec une grille de température assez fine, soit thermodynamiquement comme $L.dK^{-1}/dT = \langle \Phi^2 E \rangle - K^{-1} \langle E \rangle / T^2$. L'encart de la Fig. 47 présente cette dérivée en fonction de la taille du système, pour la valeur de température $T_c^{\text{Coulomb}} = 1.675$ estimée à partir du croisement précédemment étudié. Le caractère linéaire de cette courbe en échelle log-log confirme la présence d'une dépendance en loi de puissance, et un fit sur les 4 systèmes de plus grande taille fournit $\nu = 0.50(4)$. La barre d'erreur sur cet exposant critique tient compte des incertitudes statistiques inhérentes au Monte Carlo, de celle sur la détermination de T_c ainsi que celles dues à la procédure de fit. Finalement, l'Éq. (29) peut être ré-écrite de la façon suivante : $\Phi^2 = f(|T - T_c|.L^{1/\nu})$ indiquant que les fluctuations de flux sont universelles au point critique. En fait, il est possible de vérifier numériquement que c'est toute la distribution de flux $P(\Phi)$ qui est universelle à T_c . Sur la Fig. 48, nous avons représenté $P(|\Phi|)$ (normalisée par $P(\Phi = 0)$) pour trois tailles de systèmes, pour diverses valeurs de la température. Il apparaît clairement qu'à basse (haute) température, les flux diminuent (augmentent) avec la taille, alors qu'à T_c , la distribution $P(\Phi)$ est indépendante de la taille du système. Les petites déviations visibles sont dues aux tailles plus modestes des systèmes présentés sur cette figure, et par ailleurs à une estimation de T_c légèrement différente de celle dans la limite thermodynamique (pour la même raison).

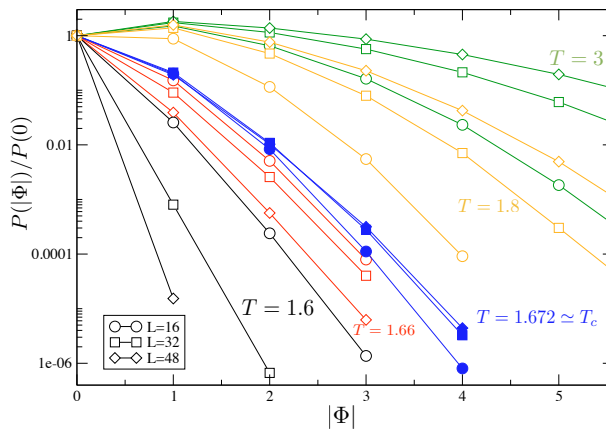


Fig. 48 Distribution de probabilité $P(|\Phi|)$ de présence d'un flux Φ (dans une direction quelconque) pour trois tailles de systèmes et pour différentes températures (deux dans les phases haute et basse température, et une proche de T_c).

Depuis la phase basse température

L'ensemble des données des Fig. 47 et Fig. 48 valide de façon quantitative l'hypothèse d'une

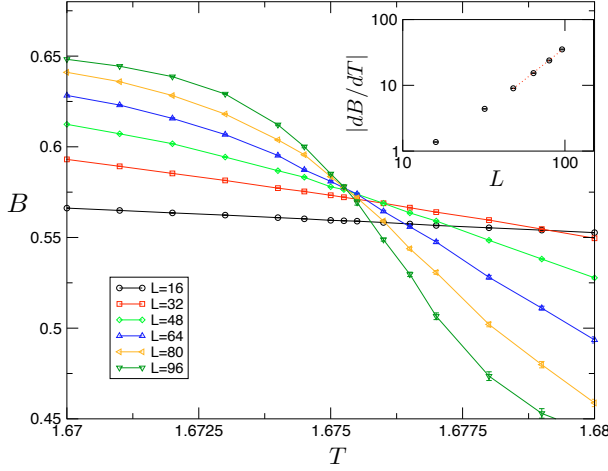


Fig. 49 Point de croisement du cumulante de Binder B en fonction de la température pour différentes tailles de systèmes. Encart : loi d'échelle suivie par la dérivée $|dB/dT|$ au point critique T_c , en fonction de la taille du système (échelle log-log). La ligne droite indique le meilleur fit en loi de puissance effectué pour les tailles $L \geq 48$.

transition du second ordre à T_c : la chute de la phase Coulombienne est continue. Il reste à montrer que c'est aussi le cas pour la naissance de l'ordre colonnaire, et si les deux phénomènes se produisent simultanément. Pour une phase qui brise une symétrie caractérisée par un paramètre d'ordre tel que donné par l'Éq. (28), il est habituel de considérer le cumulante de Binder [BINDER81]

$$B = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}$$

comme nous l'avons fait dans la Sec. II.1. Étant donné le nombre de composantes de \mathbf{m} , on s'attend à ce que B tende vers $4/9$ dans la phase haute température, et $2/3$ dans la phase basse température. C'est ce que l'on observe dans la Fig. 49 où le cumulante de Binder est représenté en fonction de la température pour différentes tailles de systèmes.

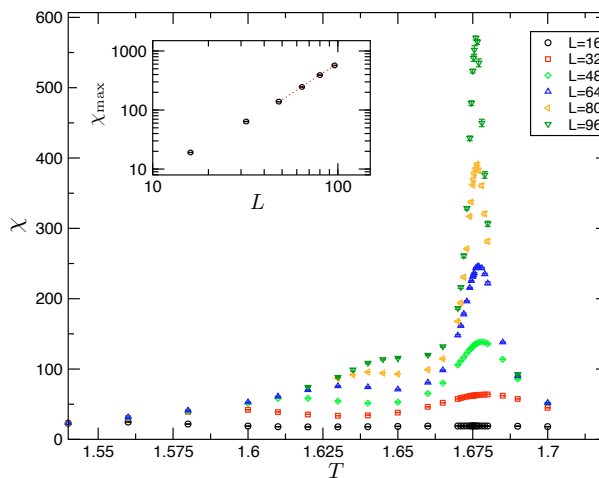
On observe aussi un croisement de courbes très net pour $T = 1.6745(5)$, aux déviations près pour les systèmes de petite taille. Tout comme pour $L.K^{-1}$, il est possible d'écrire une théorie d'échelle pour le cumulante de Binder [BINDER81], et celle-ci prédit un comportement identique à l'Éq. (29) :

$$B = h(|T - T_c|.L^{1/\nu^{\text{col}}}), \quad \text{Éq. (30)}$$

avec la fonction h là-aussi universelle, et où ν^{col} est *a priori* différent de l'exposant ν mesuré par les fluctuations de flux. L'Éq. (30) explique donc le croisement des courbes observé à $T_c^{\text{col}} = 1.6745(5)$, et indique que l'on peut déterminer ν à partir du scaling de la dérivée de B par rapport à la température : $dB/dT = L^{1/\nu}$. $(dh/dT)|_{T=T_c}$. La variation de cette dérivée (obtenue thermodynamiquement de manière identique à celle de $K^{-1}.L$) en fonction de L est représentée en échelle log-log dans l'encart de la Fig. 49. Un fit numérique sur la loi de puissance observée fournit $\nu^{\text{col}} = 0.51(3)$.

L'égalité (dans les barres d'erreur) entre T_c^{Coulomb} et T_c^{col} , ainsi qu'entre ν et ν^{col} est frappante et indique que le modèle Éq. (26) présente une transition de phase *unique et continue* entre la phase Coulombienne et la phase colonnaire. Nous discuterons dans le [Chapitre VII](#) de la nature surprenante de ce résultat.

Continuons pour l'instant la caractérisation de cette transition de phase continue. Pour une transition du second ordre, nous nous attendons à ce que la susceptibilité $\chi = L^3(\langle \mathbf{m}^2 \rangle - \langle m \rangle^2)$ associée au paramètre d'ordre diverge à la transition comme $\chi(T_c) \propto L^{\gamma/\nu}$ avec $\gamma/\nu = 2 - \eta$. C'est en effet ce que nous observons dans la [Fig. 50](#) avec un pic marqué de χ à $T_c = 1.675$, en accord avec les autres déterminations de la température critique. Le comportement de χ en fonction de la taille du système au point critique T_c est quant à lui donné dans l'encart de la figure, et un fit sur les systèmes de plus grandes tailles donne $\eta = -0.02(5)$.



[Fig. 50](#) Évolution de la susceptibilité colonnaire $\chi = L^3(\langle |\mathbf{m}|^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2)$ en fonction de la température pour différentes tailles de systèmes. L'encart montre la loi de puissance suivie par son maximum en fonction de la taille du système (échelle log-log). La ligne indique le meilleur fit en loi de puissance effectué pour les tailles $L \geq 48$.

Symétrie émergente du paramètre d'ordre à la transition

Avant de passer à l'obtention d'un autre exposant critique par des méthodes thermodynamiques, il est important de signaler une observation supplémentaire au sujet du paramètre d'ordre qu'il a été possible d'effectuer numériquement. Cette observation et l'analyse ci-dessous ont été effectuées par G. MISGUICH.

Considérons la distribution du paramètre d'ordre et en particulier celle du vecteur normalisé $\mathbf{m} = 2/L^3 \sum_{\mathbf{r} \in A} \mathbf{m}(\mathbf{r})$. Dans les états fondamentaux colonnaires, \mathbf{m} pointe dans une des six directions données $(\pm 1, 0, 0)$, $(0, \pm 1, 0)$, $(0, 0, \pm 1)$ alors que dans la phase Coulombienne $m = |\mathbf{m}|$ s'annule. Que se passe-t-il proche de T_c ? Pour étudier cela, il est pratique tout d'abord d'imposer $m_z \sim 0$ (dans les simulations, nous ne choisissons par exemple que les configurations avec $|m_z| < 0.03$) : nous avons vérifié que cela n'influçait pas les résultats. On représente ensuite graphiquement la distribution de probabilité $P(m_x, m_y, m_z \sim 0)$

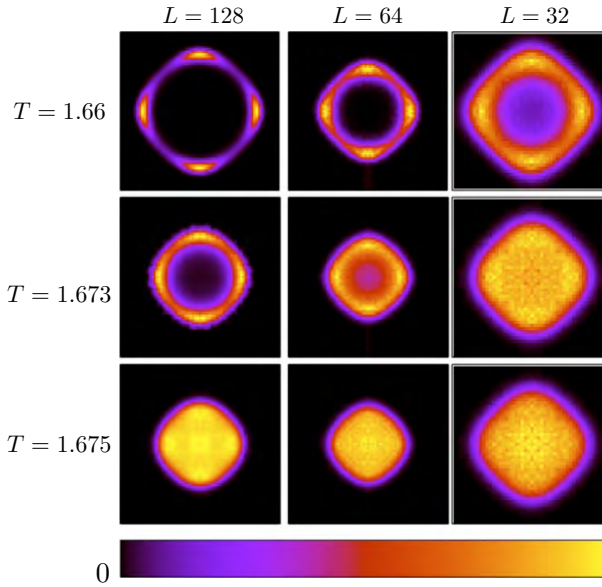


Fig. 51 Histogramme de la distribution de probabilité $P(m_x, m_y, m_z \sim 0)$ en fonction de m_x (axe horizontal) et m_y (axe vertical), pour différentes tailles de systèmes et températures $T \leq T_c$. Les unités sont arbitraires.

sous forme d'une courbe de « chaleur », comme dans la Fig. 51. Sur cette figure, les histogrammes du paramètre d'ordre ont été représentés pour plusieurs températures (au-delà, en dessous et à T_c) et pour des tailles d'échantillon croissantes. On y observe qu'à basse température (sous T_c), la distribution est piquée sur les points $(\pm m(T), 0)$ et $(0, \pm m(T))$ (la valeur $m(T)$ n'est pas égale à 1 car le paramètre d'ordre n'est pas saturé pour cette température). Pour la plus petite taille ($L = 32$), on observe toutefois une distribution assez différente, avec une forme de symétrie centrale modifiée par des anisotropies carrées. À plus haute température ($T = 1.673$, juste sous T_c) cette symétrie centrale émerge complètement et est clairement visible pour le système de plus grande taille ($L = 128$). À notre estimation de $T_c = 1.675$, l'histogramme se « remplit » et se présente sous la forme d'une boule de petite amplitude (le paramètre d'ordre étant très faible à cette température), et ceci pour toutes les tailles d'échantillon étudiées.

La Fig. 51 semble donc indiquer qu'une forme non attendue de symétrie centrale (de type $O(3)$) semble émerger proche de la température critique. Ceci est assez inattendu, connaissant la forme particulièrement anisotrope du paramètre d'ordre dans les fondamentaux et à basse température. Notons finalement que cette symétrie est visible de plus en plus proche de T_c au fur et à mesure que la taille des échantillons est augmentée. Pour quantifier cette symétrie émergente, construisons une mesure du caractère $O(3)$ de la distribution angulaire :

$$C_4 = \frac{1}{2} \langle \cos(4 \arg[m_x + im_y]) + \cos(4 \arg[m_y + im_z]) + \cos(4 \arg[m_z + im_x]) \rangle.$$

Dans le cas d'une distribution isotrope, C_4 doit s'annuler alors qu'il prend une valeur positive si un axe cristallin est privilégié. En particulier C_4 vaut 1 pour les états fondamentaux colonnaires. Bien sûr, ces prédictions ne sont valables que dans la limite thermodynamique, et il faut étudier les effets de taille finie de C_4 pour comprendre ce qui se passe proche

de T_c . C'est ce qui est effectué dans la Fig. 52, où C_4 est représenté en fonction de $1/L$ pour différentes valeurs de températures. Encore une fois, on retrouve les comportements limites attendus : C_4 s'annule (probablement de façon exponentielle) à haute température alors qu'il tend bien vers l'unité pour des systèmes de grande taille à basse température (non visible sur l'échelle de la figure).

La dépendance de C_4 précisément sous et proche de T_c est non triviale : on observe que toutes les courbes passent par un minimum à $L_0(T)$ avant de remonter pour saturer pour des systèmes de plus grande taille. Cette taille $L_0(T)$ est donc une échelle sous T_c où l'anisotropie du paramètre d'ordre est minimale, confirmant de façon quantitative ce qui avait été observé sur la distribution du paramètre d'ordre dans la Fig. 51. Les données numériques de la Fig. 52 indiquent que cette longueur semble diverger à T_c , et qu'en particulier C_4 s'extrapole vers 0 en $1/L$ à la température critique. La légère remontée pour $L = 128$ et $T = 1.675$ est interprétée comme une légère sous estimation de T_c (qui doit être légèrement supérieure à $T = 1.675$). À noter que cette taille d'échantillon la plus grande est assez demandeuse en termes de temps de calcul et n'a pas été utilisée pour la détermination de T_c par les méthodes des sections précédentes (il aurait fallu pour cela avoir une grille de température plus fine).

Au final, l'analyse des effets de taille finie de C_4 confirme donc que la distribution du paramètre d'ordre possède bien une symétrie $O(3)$ à, et uniquement à, T_c . Nous reviendrons sur cette constatation dans le chapitre suivant.

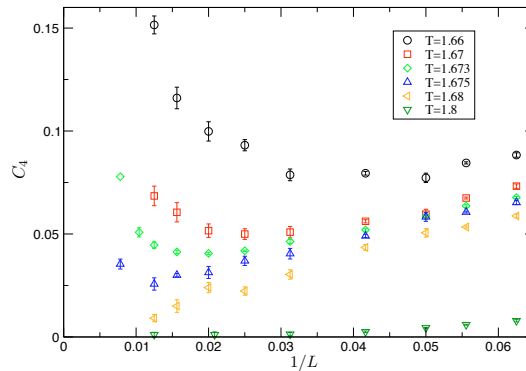


Fig. 52 Dépendance en taille finie de la mesure d'anisotropie C_4 de la distribution du paramètre d'ordre \mathbf{m} .

Chaleur spécifique

Pour conclure l'étude numérique du modèle Éq. (26) et de sa transition de phase, intéressons-nous à sa thermodynamique et en particulier à la chaleur spécifique par site définie dans l'Éq. (5). Son évolution en fonction de la température est représentée dans la Fig. 53 pour différentes tailles de systèmes.

Deux choses sont remarquables dans cette courbe. Tout d'abord, nous observons un pic très marqué autour de $T \sim 1.52$. Il est clair que ce pic n'est *pas* une singularité thermodynamique : il n'évolue *pas* en augmentant la taille des systèmes (cet effet est déjà présent pour un système de taille modeste $L = 16$). Par ailleurs, nous n'avons observé aucune autre indi-

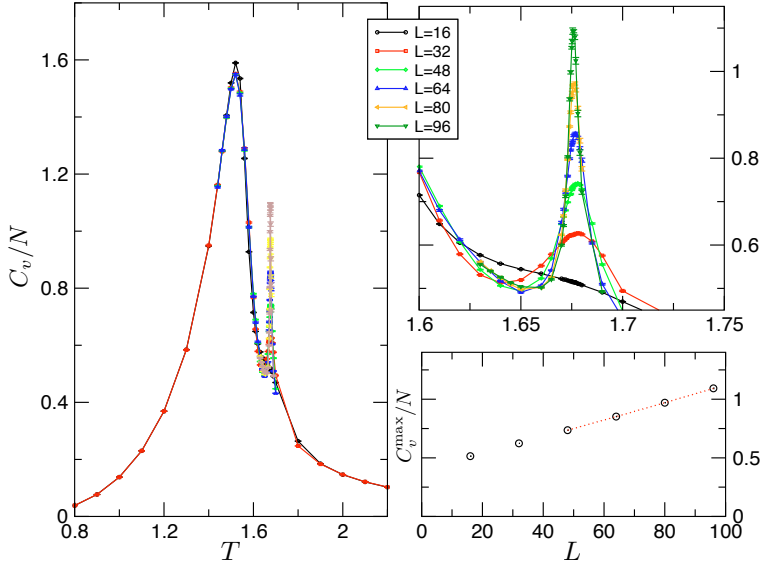


Fig. 53 Évolution de la chaleur spécifique par site C_v/N en fonction de la température pour différentes tailles de systèmes. Panneau de droite supérieur : zoom proche de la température de transition. Panneau de droite inférieur : dépendance en taille de C_v/N au point critique (échelle log-log). La ligne droite indique le meilleur fit en loi de puissance effectué pour $L \geq 48$.

cation éventuelle d'une transition de phase à cette température. À noter que cette dernière remarque est complémentaire de la première, car il existe des transitions de phase (celles continues avec un exposant critique $\alpha < 0$) où la chaleur spécifique ne diverge pas. Bien qu'il ne soit pas inhabituel d'observer des bosses, pics ou effet similaires dans une chaleur spécifique sans relation avec une transition de phase, nous n'avons pas d'explication simple pour cet effet. Tout juste pouvons-nous imaginer qu'il correspond à la libération d'entropie par un mode de mouvement des dimères, qui doit être extrêmement local puisque déjà présent pour l'échantillon $L = 16$. Nous n'avons pas poussé plus loin cette interprétation, mais il est possible que cette bosse de chaleur spécifique contienne plus d'informations.

Un second effet notable est présent proche de $T \sim 1.67$ où l'on voit apparaître un pic très marqué de C_v qui *diverge* avec la taille du système, et qui présente une enveloppe en loi de puissance caractéristique d'une transition de phase du second ordre. Il est particulièrement remarquable de constater que ce pic est très dur à détecter, car complètement masqué par la partie régulière de la chaleur spécifique pour des systèmes de petite taille. Ce pic est par exemple tout simplement absent pour $L = 16$. La divergence de ce pic est donc très soudaine : il faut une grille assez fine de température pour la capturer, comme visible sur l'encart supérieur de la Fig. 53. Bien que pour les tailles d'échantillon considérées, la hauteur de ce pic est plus faible que celle de la bosse vers $T \sim 1.52$, c'est clairement lui qui est associé à la transition de phase Coulomb-colonnaire. La température pour laquelle le pic est maximal est $T_c = 1.676(1)$ pour les plus grandes tailles de systèmes, en accord avec les autres estimations de T_c des sections précédentes. La divergence de ce pic peut être caractérisée par un exposant critique et nous avons effectué un fit de C_v/N pour les quatre plus grands échantillons en utilisant la forme suivante :

$$C_v(T_c)/N = C_{\text{reg}} + AL^{\alpha/\nu}.$$

L'inclusion de la partie régulière constante C_{reg} , qui est souvent oubliée dans les mesures d'exposants critiques (car négligeable en général devant le second terme), est ici essentielle pour cette transition. Le fit représenté par une ligne continue dans l'encart inférieur de la Fig. 53, fournit l'estimation $\alpha/\nu = 1.11(15)$. Cette fois-ci ν est associé indifféremment à la longueur de corrélation cristalline à basse température, ou à la longueur caractéristique du « désordre » de la phase Coulombienne, les deux estimations de ν étant en accord. Par propagation de l'estimation de ν et de sa barre d'erreur, nous obtenons $\alpha = 0.56(7)$. Dans les barres d'erreur, la relation d'hyperscaling $\alpha = 2 - d\nu$ est satisfaite (ici $d = 3$).

Chapitre VII. Éléments analytiques pour comprendre la transition 3d

Écrivons le cahier des charges d'une théorie analytique du modèle de dimères en trois dimensions. Il faut tout d'abord savoir décrire à la fois une phase coulombienne à haute température ainsi qu'une phase basse température colonnaire qui brise les symétries du réseau. Ensuite, il faut pouvoir expliquer une transition *continue* entre ces deux phases. L'ultime étape serait de pouvoir retrouver les valeurs des exposants critiques observées numériquement.

À ce jour, il n'est pas possible d'écrire une théorie exacte remplissant entièrement ce cahier des charges. Nous donnons par la suite quelques éléments des théories qui le font en partie, et expliquons pourquoi ce programme est difficile. Essentiellement, seuls deux scénarios théoriques assez opposés résistent au bout du compte.

VII.1. Échec des théories Ginzburg-Landau

Approche basse température

Pour essayer de décrire la transition de phase, il est naturel d'essayer d'appliquer la « recette » Ginzburg-Landau. Partons de la phase basse température où le paramètre d'ordre vectoriel $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ (Éq. (28)) a été identifié comme décrivant la brisure de symétrie colonnaire. Nous serions tentés d'écrire l'énergie libre suivante :

$$\mathcal{F}_{\text{col}}(\mathbf{m}, T) = \int d^3\mathbf{r} a(T)|\mathbf{m}|^2 + b|\mathbf{m}|^4 + \mathcal{F}_{\text{anis},\mathbf{m}} + \dots \quad \text{Éq. (31)}$$

où le coefficient $a(T) = a.(T - T_c)$ s'annulerait à la transition, $b > 0$ et où le fait d'avoir des axes privilégiés pour les états colonnaires (ceux du réseau) se traduirait par une partie anisotrope de type $\mathcal{F}_{\text{anis},\mathbf{m}} = \sum_{\alpha,\beta=x,y,z} c_{\alpha,\beta} m_\alpha^2 m_\beta^2 + \dots$.

Cette approche est veine, car quelles que soient les valeurs de a, b ou la forme exacte de $\mathcal{F}_{\text{anis},\mathbf{m}}$, une telle énergie libre prédit une décroissance exponentielle pour le corrélateur $\langle \mathbf{m}(0)\mathbf{m}(\mathbf{r}) \rangle^c$ (et donc pour les corrélations dimère-dimère) à suffisamment haute température. Ceci est en contradiction avec les corrélations dipolaires Éq. (20) de la phase Coulombienne. Très simplement, l'action Éq. (31) oublie la contrainte de dimères, qui est cruciale pour l'obtention de cette phase. Par ailleurs, le signe positif des constantes $c_{\alpha,\beta}$ (imposé par le fait que le paramètre d'ordre pointe dans les directions du réseau) impliquerait une transition (faiblement) du premier ordre [CARMONA00].

Approche haute température

Pour résoudre ce problème, le lecteur du Chapitre V sera quant à lui plutôt tenté par une approche haute température, et tentera de perturber l'énergie libre Éq. (19) par des termes d'ordre supérieurs (et éventuellement anisotropes) :

$$\mathcal{F}_{\text{Coulomb}}(\mathbf{B}, T) = \int d^3\mathbf{r} \frac{K(T)}{2} \mathbf{B}^2(\mathbf{r}) + c\mathbf{B}^4(\mathbf{r}) + d \sum_{\alpha,\beta} B_\alpha^2 B_\beta^2 \dots \quad \text{Éq. (32)}$$

pour tenter d'expliquer la transition. Il aura bien fait attention de n'écrire que des termes invariants de jauge, comme remarqué dans la [Sec. V.1.2](#). Ici encore, cette approche ne fonctionnera pas car la phase colonnaire ne peut être décrite de cette façon. Pour le voir, il suffit de constater que dans un état colonnaire, nous avons $\langle |\bar{\mathbf{B}}| \rangle = 0$, où $\bar{\mathbf{B}}$ désigne une moyenne spatiale sur \mathbf{B} .

Pour évacuer le problème d'invariance de jauge et de non brisure de symétrie de la phase de Coulomb [[ELITZUR75](#)], nous savons par ailleurs effectuer une transformation de dualité (voir [Sec. V.2.1.3](#)) pour passer des variables de dimères aux variables θ (voir [Éq. \(25\)](#)), qui sont *ordonnées* dans la phase Coulombienne. Nous écrivons alors l'énergie libre Ginzburg-Landau en termes du paramètre d'ordre dual $\mathbf{n} = \langle |\sum_{\mathbf{r}} \exp(i\theta(\mathbf{r}))| \rangle$:

Éq. (33)

$$\mathcal{F}_{\text{Coulomb,dual}}(\mathbf{n}, T) = \int d^3\mathbf{r} e(T) |\mathbf{n}|^2 + f |\mathbf{n}|^4 + \mathcal{F}_{\text{anis},\mathbf{n}} + \dots$$

La phase basse température serait alors désordonnée dans ces mêmes variables. Malheureusement, une fois de plus et de façon symétrique, une telle approche prédirait une décroissance exponentielle du corrélateur $\langle \cos(\theta_{\mathbf{0}} - \theta_{\mathbf{r}}) \rangle$ (ainsi que des corrélations dimère-dimère) à basse température, sans ordre cristallin.

Approche mixte

On peut finalement s'imaginer d'adopter un point de départ mixte, où coexisteraient les bonnes variables haute (au choix \mathbf{B} ou \mathbf{n}) et basse (\mathbf{m}) températures. Nous écrivons alors l'énergie libre $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{\text{hauteT}} + \mathcal{F}_{\text{col}}(\mathbf{m}) + \mathcal{F}_{\text{mixt}}$, avec $\mathcal{F}_{\text{hauteT}} = \mathcal{F}_{\text{Coulomb}}(\mathbf{B}, T)$ ou bien $\mathcal{F}_{\text{hauteT}} = \mathcal{F}_{\text{Coulomb,dual}}(\mathbf{n}, T)$ selon la description préférée de la phase Coulombienne. Pour des raisons de symétrie (\mathbf{m} et \mathbf{n} ou \mathbf{B} se transformant sous différentes symétries), les premiers termes de couplage doivent s'écrire $\mathcal{F}_{\text{mixt}}(\mathbf{B}, \mathbf{m}) = \lambda \mathbf{B}^2 \mathbf{m}^2 + \gamma \mathbf{B}^4 \mathbf{m}^4 + \dots$ ou bien $\mathcal{F}_{\text{mixt}}(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = \lambda \mathbf{n}^2 \mathbf{m}^2 + \gamma \mathbf{n}^4 \mathbf{m}^4 + \dots$

Bien que mélangeant variables directes et duales, cette approche est possible : elle peut décrire une phase Coulombienne (grâce à $\mathcal{F}(\mathbf{B})$ ou $\mathcal{F}(\mathbf{n})$) et une phase colonnaire (grâce à $\mathcal{F}(\mathbf{m})$), ainsi qu'une transition entre ces deux phases (grâce à $\mathcal{F}_{\text{mixt}}$). Cependant, elle prédit aussi une transition du premier ordre, de façon générique. En effet, une transition continue requiert dans cette approche que les coefficients des premiers termes $a(T)$ dans l'[Éq. \(31\)](#) et $e(T)$ dans l'[Éq. \(33\)](#) s'annulent (ou bien que $K(T)$ diverge dans l'[Éq. \(32\)](#)) *exactement* à la même température T_c . Ceci est possible mais demande un ajustement fin (*fine tuning*) des paramètres microscopiques. Ce fine tuning est présent en particulier pour les points multicritiques dans des diagrammes de phases étendus, quand par exemple une ligne de transition du second ordre rencontre une ligne de transition du premier ordre. Il n'est pas évident *a priori* que le modèle [Éq. \(26\)](#) présente un tel réglage fin, ceci d'autant plus qu'il n'existe ici qu'un seul paramètre (la température T) qui puisse être changé.

Discussion

Retenons au final qu'une approche à la Ginzburg-Landau est possible pour décrire la transition Coulomb-cristal, mais qu'elle prédit dans le cas générique (hors fine tuning) une transition du premier ordre. Ceci est similaire à la description d'une transition directe entre deux phases ayant des brisures de symétrie différentes (plus précisément, où le groupe de symétrie décrivant une phase n'est pas un sous-groupe de celui de l'autre phase) : la théorie de Landau prévoit dans ce cas aussi une transition générique du premier ordre, à l'exception de

points de transitions isolés sujets à un fine tuning qui peuvent être du second ordre. Notons toutefois que ce n'est pas exactement le cas de notre transition, car la phase de Coulomb ne présente pas de symétrie brisée. Plus généralement, tout couplage densité d'énergie-densité d'énergie dans une fonctionnelle Ginzburg-Landau conduit à la même conclusion.

Ignorons pour l'instant le cas d'un fine tuning hypothétique et essayons de comprendre pourquoi une théorie de Landau n'explique pas la transition observée numériquement. Très clairement, c'est la phase haute température inhabituelle qui pose problème : le fait que (toutes) les corrélations n'y décroissent pas exponentiellement invalide le point de départ de l'approche Ginzburg-Landau. Cette situation n'est pas nouvelle : il existe plusieurs modèles où la phase « désordonnée » n'exhibe pas de corrélations exponentielles. C'est par exemple le cas de modèles quantiques en (1+1) dimensions, comme la chaîne XXZ à la transition entre la phase critique et la phase Ising antiferromagnétique. Plus simplement, le modèle de dimères en deux dimensions étudié dans les [Chapitre II](#) et [Chapitre III](#) présente aussi cette propriété. Dans tous les exemples cités, une théorie Ginzburg-Landau *stricto sensu* ne s'applique pas non plus. Pour autant, ces transitions sont rarement décrites en premier lieu comme « inhabituelle », « non conventionnelle » ou « non Ginzburg-Landau », comme il est tentant de présenter la transition du modèle [Éq. \(26\)](#). Ceci provient du fait que nous avons un formalisme (le gaz de Coulomb, voir Réf. [\[NIENHUIS87\]](#) et [Chapitre III](#)), un nom (Kosterlitz-Thouless) ainsi qu'un mécanisme intuitif (la prolifération de défauts topologiques) pour ces transitions de phases.

Ce n'est pas le cas pour la transition Coulomb-cristal. Quel est l'équivalent d'une transition Kosterlitz-Thouless en 3d ? Quel est l'équivalent de la théorie du gaz de Coulomb en 3d ? Quel est le mécanisme en jeu, qu'y-a-t-il d'universel dans cette transition ? Ou encore : peut-on comprendre de manière générale les mécanismes pour sortir d'une phase de Coulomb, comme observé dans d'autres transitions [\[JAUBERT08,POWELL08B,SAUNDERS07,PICKLES08,SHANNON10\]](#) n'incluant pas la phase cristalline du modèle de dimères [Éq. \(26\)](#) ? Par la suite, nous ébaucherons les pistes entrevues pour répondre à ces questions.

VII.2. Approches non Ginzburg-Landau

Plusieurs propositions, assez proches, ont été effectuées pour comprendre la transition du modèle de dimères [Éq. \(26\)](#) dans un cadre autre que celui de Ginzburg-Landau. Toutes ont en commun d'interpréter la transition Coulomb-colonnaire comme une transition de Higgs. Avant d'expliquer en détail et de comparer les différentes propositions, nous allons tout d'abord donner quelques arguments physiques qualitatifs pour mieux les comprendre.

Théorie phénoménologique

La description ci-dessous est due à G. MISGUICH. L'idée est de vouloir coupler plus directement le paramètre d'ordre basse température \mathbf{m} avec les variables haute température, autrement que par un couplage énergie-énergie comme dans l'approche Ginzburg-Landau mixte. Pour cela, ré-écrivons \mathbf{m} , qui est un vecteur $O(3)$, dans la représentation CP^1 :

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha,\beta=\uparrow,\downarrow} \bar{z}_\alpha(\mathbf{r}) \sigma_{\alpha\beta} z_\beta(\mathbf{r}), \tag{Éq. (34)}$$

où $\sigma = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ est le vecteur des matrices de Pauli, et où les spineurs $z_\uparrow(\mathbf{r}), z_\downarrow(\mathbf{r})$ sont

deux nombres complexes tels que $|z_{\downarrow}(\mathbf{r})|^2 + |z_{\uparrow}(\mathbf{r})|^2 = |\mathbf{m}(\mathbf{r})|$. Par cette dernière identité, on s'aperçoit qu'il existe une redondance dans cette ré-écriture, car seuls les modules de $z_{\uparrow}(\mathbf{r}), z_{\downarrow}(\mathbf{r})$ ont une signification physique. Plus simplement, $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ est décrit par trois nombres réels, alors que $z_{\uparrow}(\mathbf{r}), z_{\downarrow}(\mathbf{r})$ par quatre. La phase des spineurs peut être arbitrairement changée *en tout site*

$$[z_{\uparrow}(\mathbf{r}), z_{\downarrow}(\mathbf{r})] \rightarrow e^{i\phi(\mathbf{r})} [z_{\uparrow}(\mathbf{r}), z_{\downarrow}(\mathbf{r})]$$

par la transformation de jauge $A_{\mu} \rightarrow A_{\mu} + \nabla_{\mu}\phi(\mathbf{r})$, sans pour autant changer $\mathbf{m}(\mathbf{r})$.

L'idée la plus importante pour la suite est que \mathbf{z} est la « bonne variable », et non plus \mathbf{m} , pour se coupler avec la variable haute température $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. La transformation de jauge citée au dessus qui ne modifie pas $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ est aussi celle qui laisse le champ de jauge invariant : $A_{\mu} \rightarrow A_{\mu} + \nabla_{\mu}\phi(\mathbf{r})$. Il est très naturel alors de proposer alors l'énergie libre phénoménologique :

$$\text{Éq. (35)} \quad \mathcal{F} = \sum_{\alpha=\uparrow,\downarrow, \mu=x,y,z} |(\nabla_{\mu} - i\mathbf{A}_{\mu})z_{\alpha}|^2 + \mathcal{F}_{\text{Coulomb}}(\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}) + \mathcal{F}_{\text{col}}(\mathbf{m} = \bar{\mathbf{z}}\bar{\sigma}\mathbf{z})$$

où l'on reconnaît l'énergie libre Ginzburg-Landau d'un supraconducteur, ici à 2 composantes et avec pour paramètres d'ordre complexes z_{α} . Les deuxième et troisième termes décrivent les énergies libres des parties Coulombienne et colonnaire et sont similaires à ceux compris dans les énergies libres Éq. (32) et Éq. (31) respectivement.

La physique peut alors se calquer sur celle d'un supraconducteur soumis à un champ magnétique. Dans la phase haute température, nous avons $\langle \mathbf{z}_{\alpha}(T > T_c) \rangle = 0$ et nous nous situons dans la phase de Coulomb où le terme magnétique $\mathcal{F}_{\text{Coulomb}}$ domine. À basse température, \mathcal{F}_{col} domine et le paramètre d'ordre supraconducteur peut acquérir une valeur non nulle $\langle \mathbf{z}_{\alpha}(T < T_c) \rangle \neq 0$, décrivant ainsi la phase cristalline. Le terme de couplage génère alors un terme de masse en $-\mathbf{A}^2$ dans l'énergie libre, tuant les fluctuations magnétiques (effet Meissner) et la phase Coulombienne. Nous avons donc ainsi une énergie libre qui permet de décrire la phase de Coulomb, la phase cristalline et un mécanisme pour la transition entre ces deux phases : il s'agit bien sûr du mécanisme de Higgs-Anderson [ANDERSON63,HIGGS64], qui permet à un champ de jauge de devenir massif en « mangeant » un mode de Goldstone associé à la brisure de symétrie décrite par le paramètre d'ordre complexe supraconducteur.

Jusqu'à quel point cette phénoménologie est valide ? Autant le cristal (pourvu qu'on fournisse la bonne forme de l'énergie libre Éq. (31)) que la phase Coulombienne sont bien décrites par l'énergie libre Éq. (35). Qu'en est-il de la transition et tout d'abord de son existence même ? Il est important de se rappeler que dans le mécanisme de Higgs-Anderson, il est nécessaire d'avoir un mode de Goldstone disponible. Cela peut paraître inquiétant puisque notre modèle de dimères ne brise que des symétries *discrètes* (rotation, translation) dans sa phase basse température. Cependant, il faut se rappeler que nous avons observé une symétrie *émergente* $O(3)$ pour le paramètre d'ordre à la transition, qui nécessite forcément un mode de Goldstone car continue (c'est cette symétrie que nous avons implicitement considérée en écrivant l'Éq. (34)). Il peut donc y avoir une transition (à une température non nulle). S'agit-il d'une transition du premier ou du second ordre ? Dans le cas de l'énergie libre d'un supraconducteur à deux composantes en présence d'un champ de jauge *non compact*, la réponse n'est pas connue d'un point de vue théorique. Les conclusions données par

différentes méthodes sont contradictoires et restent sujet à débat (dans un autre contexte que nous précisons dans la [Sec. VII.2.4](#)). Retenons simplement qu’une transition continue est possible dans le cadre de l’énergie libre [Éq. \(34\)](#), sans que l’on puisse toutefois caractériser la classe d’universalité de cette transition (et donc ses exposants critiques).

Description de mappings approximatifs

L’[Éq. \(35\)](#) a été proposée de façon phénoménologique, et ne peut en aucun cas être dérivée de façon rigoureuse à partir du modèle de dimères. Plusieurs travaux [[CHARRIER08,POWELL08,POWELL09,CHEN09](#)] ont toutefois essayé de dériver une énergie libre de façon plus systématique, au prix de certaines approximations. Tous ces travaux arrivent à une description effective identique à celle de l’[Éq. \(35\)](#), et nous les décrivons ici brièvement - les références citées contenant tous les détails.

- **Mapping à travers une théorie électrodynamique duale**

Une première approche consiste à construire directement un mapping vers une théorie quantique en 3+1 dimensions de type électrodynamique quantique, puis d’effectuer une transformation de dualité pour arriver à une action effective écrite en terme d’un vecteurs potentiel et de variables de phases de monopoles duaux. C’est la démarche utilisée par [CHARRIER et al. \[\[CHARRIER08\]\(#\)\]](#) et [CHEN et al. \[\[CHEN09\]\(#\)\]](#), et qui passe par plusieurs étapes que nous expliquons brièvement.

Premièrement, le point de départ est d’écrire un champ vectoriel $E^\alpha(\mathbf{r})$ qui compte le nombre de dimères sur le lien α au site \mathbf{r} : ce champ est très similaire au champ $B^\alpha(\mathbf{r})$ de l’[Éq. \(17\)](#) à un *shift* près et possède lui aussi une divergence contrainte $\nabla \cdot \mathbf{E} = \pm 1$. Comme première approximation, on autorise ce champ à prendre toutes les valeurs entières, et non pas seulement $0, \pm 1$: on arrive à un modèle de type courants de liens (voir [Éq. \(24\)](#)). Les interactions entre dimères pourraient en principe s’écrire en termes des variables de liens aussi, mais ce n’est pas la forme habituelle choisie. On préférera les introduire de façon effective plus tard.

Ensuite, on effectue une transformation de dualité [[BERGMAN06,CHEN09](#)], similaire à celle introduite avant l’[Éq. \(25\)](#), qui permet d’introduire des variables de phase, interprétées comme celles de monopoles magnétiques dans le langage de l’électrodynamique, ainsi qu’un potentiel vecteur dual associé au champ \mathbf{E} . À noter que dans cette représentation, les rôles des champs électrique \mathbf{E} et magnétique \mathbf{B} (ainsi que celui des charges électriques et magnétiques) sont inversés par rapport à ceux introduits dans la [Sec. VI.2.2](#). Cette inversion de rôle des variables, fréquent dans la littérature sur la phase Coulombienne et qui porte souvent à confusion, provient du fait que l’on essaye d’obtenir ici une description quantique de la théorie des champs en 3+1 dimensions, plutôt qu’un raccourci en 3+0 dimensions que nous avons pris par commodité pour le [Chapitre V](#). La phase coulombienne est toujours comprise comme une phase déconfinée pour les charges électriques, qui sont ici les monomères du modèle de dimère original. Les monopoles magnétiques sont des excitations confinées dans cette phase, et possèdent un gap dans cette description quantique. Ces monopoles peuvent aussi condenser (et détruire ainsi cette phase Coulombienne), à travers un mécanisme de Higgs. Simultanément, les charges électriques deviennent confinées, et nous avons affaire à la phase colonnaire, où les monomères sont effectivement confinés dans le cristal.

Quelle est la différence fondamentale alors avec le modèle XY de l’[Éq. \(25\)](#) ? Le fait crucial

est que les monopoles magnétiques ne peuvent condenser que dans des structures spatiales précises, édictées par les symétries du réseau et des interactions entre dimères. L'analyse détaillée de ces symétries montre que ces charges magnétiques voient une structure de flux magnétique précise dans le réseau, qui frustré leur mise en ordre. Sans cette frustration, le modèle serait en effet dual à un modèle XY. La frustration consiste à remplacer le modèle de l'Éq. (25) par un modèle du type $Z = \sum \prod_i d\theta_i \exp(-J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j - X_{ij}))$, avec X_{ij} un « potentiel vecteur » frustrant, forçant la structure de flux magnétique dans le réseau.

Pour aller plus loin, il est possible d'introduire une version « de cœur mou » des opérateurs de monopoles en suivant les travaux de MOTRUNICH et SENTHIL [MOTRUNICH05]. On écrit alors un Hamiltonien effectif de type liaisons fortes pour ces monopoles se déplaçant dans un réseau cubique possédant cette structure précise de flux magnétique. On trouve deux minima dans la relation de dispersion de ce Hamiltonien, et une théorie de type Ginzburg-Landau peut être écrite pour les deux champs décrivant les fluctuations autour de ces minima. En particulier, il est possible [BERGMAN06] de « geler » ces champs dans la direction du temps imaginaire, afin d'obtenir une description en 3+0 dimensions (à température finie), au lieu de 3+1 dimensions, afin de se rapprocher plus précisément du modèle de dimères classique originel. Le résultat final de cette description, non rigoureuse et parfois complexe, est exactement l'énergie libre devinée dans l'Éq. (35).

Il est aussi possible d'effectuer des simulations numériques de la théorie de jauge effective intermédiaire, exprimée en termes du potentiel vecteur dual et des variables de phases. Cela a l'avantage d'être un peu plus simple numériquement; ceci est important étant données les difficultés évoquées plus loin dans la Sec. VII.2.3 pour simuler l'Éq. (35). Par ailleurs, cela permet aussi de garder le contact avec le modèle de dimères original, par exemple en permettant l'écriture du paramètre d'ordre colonnaire. Les simulations Monte Carlo de la théorie de jauge intermédiaire effectuées par D. CHARRIER [CHARRIER08] mettent en évidence l'existence d'une transition *continue* entre une phase de Coulomb et une phase colonnaire. Ceci prouve que cette approche par des théories effectives contient certes des approximations, mais peut bien décrire une transition Coulomb-cristal continue comme désiré.

- **Mapping vers un problème quantique en deux dimensions**

POWELL et CHALKER [POWELL08,POWELL09] proposent une autre transformation (*mapping*) pour comprendre la transition dans le modèle de dimères : identifier un modèle quantique en 2+1 dimensions dont l'intégrale de chemin donnerait le modèle classique en 3+0 dimensions, puis espérer (et c'est le cas) que le modèle quantique ait des propriétés connues en ce qui concerne sa physique de basse énergie et sa criticité. Cette approche originale (le mapping inverse de 2+1 vers 3+0 dimensions est plus habituel) nécessite elle aussi plusieurs étapes et approximations que nous décrivons brièvement.

Tout d'abord, les auteurs des Réfs. [POWELL08,POWELL09] choisissent une direction du réseau 3d comme celle d'un temps imaginaire discret τ : afin d'éviter toute brisure explicite de symétrie, la direction [111] est choisie. Une matrice de transfert T est alors définie, permettant de connecter les configurations de dimères d'une tranche de temps τ à la tranche $\tau + 1$, ce qui formellement permet de définir un Hamiltonien quantique $T = \exp(-H_B)$. La matrice de transfert n'est pas écrite explicitement, mais l'on peut sous des hypothèses raisonnables de localité et des raisons de symétries, construire le Hamiltonien H_B . Il s'agit d'un modèle de bosons de cœur dur, sur le réseau kagome, à un remplissage 1/6 : dans ce mapping, un dimère est remplacé par un boson de cœur dur. Il s'avère que le Hamiltonien est non

hermitien, ce qui est crucial pour permettre de retrouver les corrélations dipolaires entre dimères. Ici, comme entrevu dans la [Sec. V.2.1.2](#), la phase Coulombienne est donnée par la phase superfluide des bosons, et la phase colonnaire comme une phase isolant de Mott pour les bosons. L'isolant est ici non trivial, avec une brisure de symétrie d'espace où les bosons se localisent sur un des sites autour d'un hexagone du réseau kagome (il y a en tout six sites non équivalents, correspondant aux six fondamentaux du modèle colonnaire) : on parle d'isolant de Mott fractionnaire avec un remplissage $p/q = 1/6$.

L'utilité de ce mapping provient du fait que la théorie critique de la transition entre superfluide et isolant de Mott fractionnaire (brisant une symétrie d'espace) a été étudiée en détail par [BALENTS *et al.* \[BALENTS05\]](#). Alors qu'on s'attend naïvement à une transition du premier ordre entre ces deux états brisant des symétries différentes, il a été proposé par des arguments de dualité que dans certaines situations (pour certains remplissages), une transition continue pouvait exister. En adaptant les arguments de la Réf. [\[BALENTS05\]](#) au cas de la transition superfluide-isolant de Mott avec remplissage $1/6$ sur le réseau kagome, [POWELL](#) et [CHALKER](#) trouvent une théorie critique dans le continu, qui n'est rien d'autre que l'énergie libre de l'Éq. (35).

En ne retenant que les premiers ordres dans l'analyse de symétrie, la théorie critique possède une symétrie $SU(2)$ émergente qui correspond à une symétrie $O(3)$ pour le paramètre d'ordre colonnaire \mathbf{m} (Éq. (28)), comme observé numériquement (voir [Sec. VI.3.3](#)) : cette propriété est une prédiction non triviale de ce mapping. L'autre avantage certain est que ce mapping fait un lien avec une autre physique, celle des points critiques déconfinés (voir [Sec. VII.2.4](#)), à travers la transition 2d superfluide-isolant de Mott fractionnaire.

Analyse de l'énergie libre effective

Les arguments phénoménologiques de la [Sec. VII.2.1](#), ainsi que les deux *mappings* approximatifs (électromagnétisme dual et vers un problème quantique en 2+1 dimensions) introduits dans la [Sec. VII.2.2](#), convergent vers la même description de la transition Coulomb-cristal en termes de l'énergie libre effective Éq. (35). Cette description fournit un mécanisme pour expliquer la transition, ce qui est loin d'être trivial étant donnés les arguments de la [Sec. VII.1](#). Si l'on ne se contente pas de la connaissance d'un mécanisme, mais que l'on recherche à expliquer plus précisément les résultats numériques, la situation se corse. En particulier, une transition continue entre la phase de Coulomb et la phase colonnaire est possible dans ce scénario, mais une transition du premier ordre l'est aussi. Et si une transition continue peut être comprise, rien n'indique à ce stade quelle est sa classe d'universalité.

L'énergie libre effective Éq. (35) n'est pas nouvelle et a déjà été écrite dans d'autres contextes, sur lesquels nous reviendrons. Servons-nous et énonçons les résultats connus à ce sujet.

Considérons tout d'abord le cas où l'on prend la première partie de la contribution de la phase colonnaire sans les termes anisotropiques, à savoir $\mathcal{F}_{\text{col,iso}}(\mathbf{m}, T) = \int d^3\mathbf{r} a(T) |\mathbf{m}|^2 + b |\mathbf{m}|^4$. S'il n'y avait qu'une seule composante « supraconductrice » (c'est à dire pas d'indice α pour z_α), il est connu depuis les travaux de [DASGUPTA](#) et [HALPERIN \[DASGUPTA81\]](#) que ce modèle serait dual à une théorie XY, et que donc la transition serait continue dans la classe d'universalité du modèle 3d XY, comme c'est le cas pour le modèle de l'Éq. (25). C'est bien la présence d'une structure de flux non triviale due aux interactions entre dimères qui change la donne en créant un deuxième minimum dans le modèle de liaisons fortes des monopoles, et donc une deuxième composante « supraconductrice ». Dans ce cas, la transformation de

dualité [DASGUPTA81] n'existe plus, et il faut recourir à une analyse par groupe de renormalisation ou à des simulations numériques.

Du côté analytique, le développement en $\epsilon = 4 - d$ ne donne pas de nouveau point fixe [BALENTS05], ce qui indiquerait plutôt une transition de phase du premier ordre. Il y a toutefois plusieurs arguments qui remettent en cause la validité d'un développement en ϵ pour ce type d'action de manière générale [MOTRUNICH04], et il n'est pas sûr que celle-ci soit valide et conclusive. De plus, si l'on augmente le nombre de composantes jusqu'à N et que l'on prend la limite $N \rightarrow \infty$, on obtient là aussi une transition continue. Le cas $N = 2$ qui nous intéresse n'est malheureusement pas assez grand pour faire un développement en $1/N$.

Du côté numérique, la situation est là aussi controversée. Il faut passer par une discrétisation de cette théorie continue sur un réseau, et certaines discrétisations conduisent à des transitions continues [MOTRUNICH08], d'autres à des transitions faiblement du premier ordre [KUKLOV08]. Comme remarqué par POWELL et CHALKER [POWELL09], la théorie critique de l'Éq. (35) possède un paramètre libre, K de la partie Coulombienne Éq. (32), une fois que le premier terme $a(T)$ de l'Éq. (31) est pris comme nul à la transition $T = T_c$. Il est donc possible que l'on puisse passer d'une transition continue à une transition premier ordre, via un point tricritique, en modifiant K (ce qui n'est pas fait explicitement dans le modèle de dimères, mais simplement indirectement à travers la variation de K en fonction de la température). Cette ligne critique est d'ailleurs observée dans les simulations de la Réf. [MOTRUNICH08] pour une certaine discrétisation de la théorie : les exposants de la ligne de transition de phase continue ne sont pas compatibles avec ceux observés du modèle de dimères, sauf au point tricritique où ils sont plus proches.

La présence de termes anisotropes $\mathcal{F}_{\text{anis}}$ n'arrange que partiellement la situation. Les symétries de la phase ordonnée (où le paramètre d'ordre \mathbf{m} pointe suivant les axes x, y et z) indiquent un terme anisotrope dominant $\mathcal{F}_{\text{anis}}(\mathbf{m}) = r(m_x^2 m_y^2 + m_x^2 m_z^2 + m_y^2 m_z^2)$ avec $r > 0$. Un comptage de puissance dans la théorie des champs [POWELL09] indique que ce terme ne devrait pas être pertinent, encore faudrait-il que ce comptage de puissance soit valide (ce qui n'est pas certain étant donné que le point fixe n'est pas connu dans le cas à deux composantes). Ce terme serait en fait dangereusement non pertinent, puisqu'il ne changerait pas la classe d'universalité d'une transition de phase continue (si elle existe), mais qu'il influencerait le choix de la phase ordonnée. Les simulations de la théorie de jauge intermédiaire de CHARRIER *et al.* [CHARRIER08] (qui contiennent donc les effets d'anisotropie puisqu'une phase colonnaire est détectable à température) indiquent une transition continue, avec toutefois des exposants différents de ceux trouvés pour le modèle de dimères original. Dans les autres contextes où cette énergie libre apparaît, l'anisotropie a aussi été étudiée dans une version « plan facile » (*easy plane*). L'analyse théorique est un peu simplifiée (grâce à une dualité entre la phase de Coulomb et la phase ordonnée qui a une brisure de symétrie $U(1)$ dans ce cas) et semble indiquer qu'une transition continue est plus facile. Les résultats sur une version discrétisée sont aussi controversés avec des premiers résultats [MOTRUNICH04] indiquant une transition continue, par la suite contestés par des simulations plus poussées [KUKLOV04, KUKLOV06] détectant une transition faiblement du premier ordre.

Relation avec les points critiques quantiques déconfinés

Le fait de proposer l'énergie libre effective Éq. (35) comme théorie critique pour le modèle de dimères le replace dans un contexte beaucoup large. En effet, cette même théorie effective a été proposée pour décrire des transitions de phase quantiques continues

en deux dimensions entre deux états différents : tout d'abord entre un état antiferromagnétique (Néel) et un état Cristal de liens de Valence (*Valence Bond Crystal*, dénoté VBC) [SENTHIL04,SENTHIL04BB], puis ensuite entre un état superfluide et un isolant de Mott fractionnaire [BALENTS05].

Cette théorie, ou plutôt ensemble d'arguments, est dénommée « points critiques quantiques déconfinés » (PCQD) [SENTHIL04,SENTHIL04B,SENTHIL05]. Nous ne rentrons pas dans les détails et les cœurs des arguments et motivations de ces théories (une introduction légèrement plus complète sera donnée Sec. IX.2), mais édicterons simplement leurs propriétés principales. Ce sont des transitions de phase quantiques (à température nulle) où, sous l'influence d'un paramètre varié dans le Hamiltonien, nous passons d'une phase ordonnée (Néel ou superfluide) vers une autre phase ordonnée (VBC ou isolant de Mott fractionnaire). Traditionnellement, on s'attend à une transition de phase génériquement du premier ordre, mais un ensemble d'arguments indique que cette transition de phase peut être continue de façon générique, en contradiction avec une approche Ginzburg-Landau.

La surprise de ne pas vérifier l'approche Ginzburg-Landau semble un peu plus forte dans le cas des PCQD car, des deux côtés de la transition, on trouve une phase ordonnée avec une brisure de symétrie spontanée (contrairement au cas du modèle de dimères). Dans le cas des PCQD, la mécanique quantique des défauts topologiques d'un paramètre d'ordre crée des corrélations de l'autre côté de la transition [BALENTS05] : ainsi, l'opérateur qui décrit le paramètre d'ordre VBC est strictement proportionnel à celui qui crée un monopole (ou *hedgehog*), le moment-endroit (en 2+1 dimensions) où le nombre de défauts topologiques (les *skyrmions*) dans le paramètre d'ordre antiferromagnétique change [SENTHIL04B]. De même, les défauts de vortex du superfluide ont des symétries particulières permettant de pré-empter l'apparition de l'ordre isolant de Mott fractionnaire [BALENTS05]. En quelque sorte, les deux phases en jeu « se connaissent » par l'intermédiaire de leur défauts dans leur paramètre d'ordre (alors qu'elles ne se connaissent pas par l'intermédiaire direct de leur paramètre d'ordre). Il apparaît plausible alors qu'une transition de phase continue puisse exister.

Comment se place le modèle de dimères dans ce contexte ? Alors que dans le cas avec la transition superfluide-isolant de Mott fractionnaire les correspondances sont bien établies (« superfluide » ~ « Coulomb », « isolant fractionnaire » ~ « colonnaire »), l'analogie avec la transition Néel-VBC révèle toutes les subtilités des arguments de dualité. Naturellement, on aurait envie d'identifier le cristal VBC avec le cristal colonnaire et l'état de Néel avec la phase de Coulomb (ou le superfluide). À ce stade, il faut remarquer que ce sont bien les paramètres d'ordres de la phase colonnaire et de la phase Néel qui sont « fractionnalisés » dans la représentation CP^1 de l'Éq. (34), et dont les fractions (les spinons) « émergent » à la transition. Dans le cas de la transition Néel-VBC, les spinons présentent un gap dans la phase VBC (il n'y a plus de paramètre d'ordre Néel) où les monopoles vont proliférer en créant l'ordre VBC [SENTHIL04B]. S'ils ne pouvaient proliférer, on observerait la phase parente qui est un liquide de spins $U(1)$ [SENTHIL05]. Dans le modèle de dimères, les monopoles ne peuvent proliférer car ils sont *interdits par construction* (pas de monomères) : on observe la phase parente qui n'est rien d'autre que la phase Coulombienne. De même, le modèle de dimères possède des symétries de réseau qui, si elles ne sont probablement pas pertinentes à la transition (Sec. VI.3.3), forcent le paramètre d'ordre colonnaire à pointer selon les axes du réseau. On a donc les équivalences : « phase colonnaire » ~ « Néel (agrémenté d'anisotropies de réseau) », et « Coulomb » ~ « liquide de spins $U(1)$ » qui, en présence de monopoles, devient un VBC.

Que peuvent s'apporter mutuellement ces deux types de physique présentes dans le modèle de dimères et les PQCD ? Malheureusement peu si l'on recherche des résultats exacts et sans appel. En pratique, cette double lecture peut éclairer notre compréhension des deux problèmes. Au travers de leur description effective commune par l'Éq. (35), la théorie des PCQD indique effectivement qu'une transition de phase non Ginzburg-Landau est possible pour le modèle de dimères, ce qui justifie *a posteriori* l'analyse de la Sec. VII.1. Nous bénéficions aussi de l'étude systématique par groupe de renormalisation de l'Éq. (35), ainsi que par simulations numériques de différentes versions discrétisées de cette théorie. Malheureusement, les résultats ne sont pas conclusifs : le débat reste ouvert, notamment numériquement, pour savoir si l'Éq. (35) peut admettre une transition de phase génériquement continue, et si c'est le cas quelle en serait la classe d'universalité.

De manière générale, le scénario PCQD est difficile à vérifier car, outre le fait que différentes discrétisations sur réseau de la théorie des champs proposées fournissent des résultats différents, il n'est pas précisé s'il existe des modèles simples quantiques réalisant cette physique (voir par exemple les ellipses représentant le terme à rajouter pour induire les PCQD dans les Réfs. [SENTHIL04,SENTHIL04B]). En effet, il est facile d'écrire un modèle brisant spontanément la symétrie $SU(2)$ pour créer un ordre antiferromagnétique : le modèle d'Heisenberg le fait naturellement. Par contre, il est plus difficile de trouver un terme qui crée *spontanément* un VBC sans inclure de la frustration avec le terme d'Heisenberg. Sachant que la frustration entraîne un grand problème (dit de signe) dans les simulations numériques stochastiques, la tâche n'est pas aisée si l'on veut discuter des propriétés critiques (nécessitant généralement de grands échantillons). Il existe toutefois une famille de modèles non frustrés, où la physique PCQD est en jeu (voir discussion plus bas et dans la Sec. IX.2). Dans ce cadre, le modèle de dimères Éq. (26) apporte peut-être un peu plus à la théorie des PCQD. En effet, les modèles classiques sont plus faciles à construire (pas besoin d'ellipses) ou à étendre, plus faciles à simuler (il n'y a pas de problème de signe) et certainement plus pédagogiques. Si l'on croit à la notion d'universalité, la nouvelle classe d'universalité présente aux PCQDs en 2+1 dimensions doit exister aussi pour des modèles classiques en 3+0 dimensions, si les bons ingrédients de symétrie sont présents. L'avantage du modèle de dimères est qu'il implémente directement, et pour toute configuration, la contrainte d'absence de divergence du champ magnétique fictif, au lieu d'une simple contrainte énergétique sur ces monopoles. De plus, on peut utiliser un algorithme efficace non local (voir Sec. I.3.2) permettant d'atteindre de grandes tailles d'échantillons. Ceci le distingue du modèle $O(3)$ sans monopoles [KAMAL93,MOTRUNICH04], qui a été le premier proposé (et peut-être le plus pertinent) pour illustrer la physique PCQD (dans ce modèle classique, les monopoles sont supprimés aussi explicitement « à la main » en examinant et refusant les configurations qui en possèdent, ce qui s'avère coûteux numériquement). Plus récemment, un modèle de boucles classiques en interactions en 3 dimensions a aussi été proposé et étudié [NAHUM15] pour tester la physique des PQCD, avec les mêmes avantages que le modèle de dimères.

À ce titre, le modèle de dimères Éq. (26) est aussi intéressant que les modèles de spins quantiques appelés J-Q [SANDVIK07,LOU09], qui mettent en compétition un terme d'échange J (favorisant l'antiferromagnétisme) et un terme à quatre spins Q favorisant l'apparition de l'ordre VBC (voir Sec. IX.2 pour une définition). Après là aussi quelques controverses [SANDVIK07,MELKO08,JIANG08,SANDVIK10], il est établi que ces modèles possèdent une transition continue entre ces deux ordres, avec toutefois des corrections de scaling im-

portantes [SANDVIK10,KAUL11,BANERJEE11], voire des violations logarithmiques du scaling [SANDVIK10,BANERJEE10] ou même une absence totale de scaling due à des variables dangereusement non pertinentes [KAUL11]; tout ceci rendant difficile l'estimation précise des exposants critiques. Le modèle de boucles [NAHUM15] présente lui aussi de fortes violations de scaling. Le modèle de dimères possède l'avantage de ne pas posséder apparemment de telles fortes corrections/violations de scaling¹². Par ailleurs, comme proposé récemment [SREEJITH15] (voir discussion dans la Sec. VIII.2.3), il est aussi possible de ré-introduire à la main des monopoles « multiples » dans le modèle de dimères pour mesurer leur dimension d'échelle et leur pertinence, ce qui est impossible dans les modèles de spins.

VII.3. Scénarios alternatifs et conclusions partielles

Un point tricritique ?

Nous avons présenté en détail pourquoi un scénario non Ginzburg-Landau (Sec. VII.2) devait s'appliquer à la transition de phases continue observée pour le modèle l'Éq. (26), proposé une énergie libre effective pour la théorie des champs sous-jacente Éq. (35), et fait l'analogie avec la théorie des points critiques quantiques déconfinés qui mettent en jeu des transitions ne répondant pas au paradigme de Ginzburg-Landau.

Cette présentation peut paraître partisane. Quelles autres alternatives peuvent être proposées ? Pour s'assurer en pré-requis de leur validité, il faudra qu'elles expliquent pourquoi une approche Ginzburg-Landau simple ne peut s'appliquer (Sec. VII.1), qu'elles admettent une transition directe continue et, si possible, qu'elles justifient les exposants critiques obtenus numériquement.

À notre connaissance, la seule possibilité évoquée est le scénario conventionnel (mais exceptionnel au sens de Ginzburg-Landau), où le modèle de l'Éq. (26) se trouve à un point *tricritique*, ou multicritique. Dans ce scénario, l'approche mixte de la Sec. VII.1.3 est correcte, mais pour une raison inconnue les termes quartiques (en $|\mathbf{m}|^4$, $|\mathbf{n}|^4$ ou bien $|\mathbf{n}|^2|\mathbf{m}|^2$) voient leur coefficient s'annuler simultanément avec le coefficient $a(T_c)$ de l'Éq. (31) au point critique. Dans ce cas, l'approche Ginzburg-Landau permet une transition de phase continue entre les états Coulombien et colonnaire.

En général, on peut trouver un point tricritique dans un diagramme de phase dépendant de deux paramètres. Or nous n'avons ici à notre disposition qu'un seul paramètre, la température : ce scénario implique donc l'existence d'un paramètre caché qui serait « auto-ajusté » (*self-tuned*) à une valeur impliquant un point tri-critique. Ceci pourrait expliquer que les valeurs des exposants critiques observées sont compatibles avec ceux d'une théorie $O(N)$ tricritique en 3d, sa dimension critique supérieure [ZINN-JUSTIN10]. En l'absence de données autres que celles du modèle de l'Éq. (26), ce scénario est aussi difficile à réfuter qu'à vérifier : quel serait le paramètre caché et quelle symétrie du modèle de l'Éq. (26) ferait que ce paramètre soit auto-ajusté ? La seule base microscopique proposée à ce jour pour l'existence de ce point tricritique est une version ébauchée par PAPANIKOLAOU et BETOURAS [PAPANIKOLAOU10] d'un champ moyen [PAPANIKOLAOU07] sur les variables de Grassman [SAMUEL80] représentant les dimères. Malheureusement, cette idée n'a pas été élaborée plus conséquemment.

Nous verrons toutefois (Sec. VIII.2.2) dans une extension du modèle Éq. (26) que celui-ci se trouve effectivement à proximité d'un point tricritique qui pourrait influencer la valeur

¹² Si ces corrections existent, elles sont du moins bien plus faibles que dans les autres exemples numériques de PCQD.

des exposants obtenus numériquement. Cependant, comme détaillé dans la [Sec. VIII.2.2](#), ce point tricritique est lui aussi non conventionnel, et n'admet pas une description simple par une approche Ginzburg-Landau.

Une transition du premier ordre ?

Un autre scénario beaucoup plus simple pourrait tout expliquer : l'approche Ginzburg-Landau est valide et la transition Coulomb-cristal est du premier ordre. Nous ne l'observons pas numériquement comme telle car les échantillons simulés sont trop petits, avec $L_{\max} < \xi^*$ où $\xi^* < +\infty$ est la longueur de corrélation (du paramètre d'ordre colonnaire par exemple) à la transition du premier ordre. La « quasi-criticalité » que nous observons serait alors fortuite. Il s'est avéré que certains modèles de magnétisme classique frustré possédaient une transition continue considérée comme inhabituelle [DELAMOTTE04], qui s'est finalement révélée du premier ordre lorsque des plus grandes tailles d'échantillon ont pu être atteintes numériquement [NGO08]. À noter que les pseudo-exposants critiques observés sur des systèmes de trop petite taille étaient proches de ceux d'un point tricritique, ce qui peut être compris dans certains cas par les techniques du groupe de renormalisation non perturbatif [DELAMOTTE04].

Comme pour toute simulation numérique sur réseau de taille finie, ce scénario ne peut jamais être écarté. Toutefois, notons simplement qu'aucun indice numérique ne trahit l'influence d'une transition de phase du premier ordre sur des échantillons contenant jusqu'à 128^3 sites, que ce soit dans la thermodynamique (voir les courbes de chaleur spécifique [Fig. 53](#) ou de cumulant d'énergie $V(E)$ dans la [Fig. 54](#)) ou dans l'application de la théorie de scaling de taille finie (voir les [Fig. 47](#) et [Fig. 49](#)). De plus et en anticipant sur le [Chapitre VIII](#), plusieurs extensions du modèle de dimères présentant des transitions clairement discontinues, voient leurs indicateurs de transition du premier ordre s'annuler dans la limite correspondant au modèle [Éq. \(26\)](#). Enfin, notons avec la Réf. [POWELL09] que même si la transition est discontinue, la longueur de corrélation ξ^* est au moins d'ordre 10^2 , ce qui indique que toutes les descriptions continues envisagées telles que discutées dans la [Sec. VII.2](#) ont un sens (même si elles s'effondrent plus tard pour le modèle en question). Même dans ce scénario négatif, le modèle [Éq. \(26\)](#) aura eu le mérite de poser de bonnes questions.

Conclusion partielle sur les scénarios existants pour cette transition de phase

Résumons brièvement les théories encore en course pour expliquer la transition Coulomb-cristal. Le scénario non Ginzburg-Landau de l'[Éq. \(35\)](#) est séduisant par divers aspects mais reste difficile à valider. Le scénario (Ginzburg-Landau) d'un point tricritique ([Sec. VII.3.1](#)) est encore possible, bien que les raisons profondes pour son existence n'aient pas été développées. À noter que ces deux scénarios ne sont pas totalement incompatibles puisqu'on peut imaginer l'existence d'un point tricritique non Ginzburg-Landau. Comme déjà indiqué, nous verrons dans la [Sec. VIII.2.2](#) que le modèle [Éq. \(26\)](#) se situe effectivement proche d'un tel point tricritique non Ginzburg-Landau. Enfin, n'oublions pas l'existence du scénario premier ordre, bien qu'il soit totalement non prédictif en l'absence de la connaissance de ξ^* .

Comment valider ou invalider ces scénarios ? Le scénario non Ginzburg-Landau aurait pu être confirmé si les simulations d'autres modèles, différents mais décrits par la même énergie libre [Éq. \(35\)](#), présentait eux aussi une transition continue avec les *mêmes* exposants critiques. Ce n'est malheureusement pas le cas. Parmi les travaux qui trouvent une transition

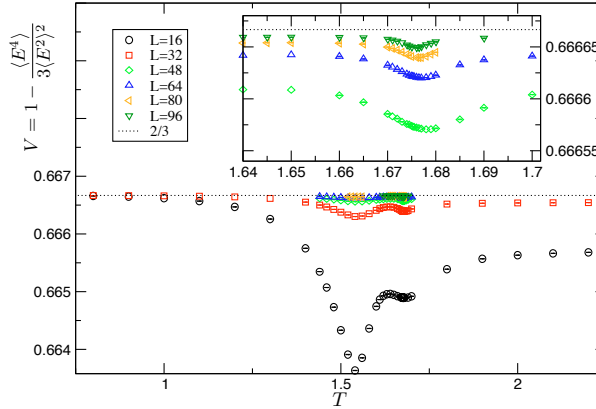


Fig. 54 Évolution du cumul de l'énergie $V = 1 - \langle E^4 \rangle / 3 \langle E^2 \rangle^2$ en fonction de la température pour différentes tailles de systèmes. Deux minima sont visibles à une température $T \sim 1.5$ et proche de $T_c \simeq 1.675$ pour les systèmes de petite taille, mais ceux-ci tendent à s'annuler dans la limite thermodynamique. Ceci montre qu'il n'y a pas signe de transition du premier ordre, qui serait signalée par un minimum différent de $2/3$ à T_c dans la limite thermodynamique. L'encart effectue un zoom proche de T_c pour les systèmes de plus grande taille.

continue pertinente pour notre discussion, la Réf. [MOTRUNICH04] étudie un modèle classique $O(3)$ sans monopoles, ainsi qu'une version discrétisée de l'Éq. (35) et trouvent des exposants critiques $\nu \in [0.7, 1.0]$, $\eta \in [0.5, 0.8]$ clairement différents.

Deux explications sont possibles. Premièrement, le modèle $O(3)$ ne possède pas d'anisotropie favorisant certaines directions pour le paramètre d'ordre basse température, contrairement au modèle de dimères, et celles-ci pourraient changer la classe d'universalité. On aurait alors deux classes d'universalité pour ces nouvelles transitions non Ginzburg-Landau : une pour une phase basse température avec symétrie $O(3)$ (avec les exposants de la Réf. [MOTRUNICH04]), et une autre pour le modèle avec anisotropie cubique (avec les exposants du modèle de dimères Éq. (26), qui seraient par hasard proches de ceux d'un point tricritique). La seconde possibilité est que ces termes d'anisotropie ne sont pas pertinents et que le modèle de la Réf. [MOTRUNICH04] et de l'Éq. (26) aient des transitions dans la même classe d'universalité : les exposants critiques observés ne seraient que des pseudo-exposants dus à des problèmes de taille finie dans un des deux modèles, voire les deux. Cette deuxième solution paraît plus probable étant données les indications d'une symétrie $O(3)$ émergente au point critique données dans la Sec. VI.3.3.

D'autres simulations plus récentes [MOTRUNICH08] trouvent, pour certaines versions sur réseau de l'Éq. (35), les exposants $\nu = 0.7 - 0.75$ et $\eta = 0.2 - 0.4$ pour la transition de Higgs générique, et $\nu \sim 0.5$, $\eta \sim 0$ proche d'un point tricritique. Dans ce dernier cas, les exposants sont compatibles avec ceux proposés pour le modèle de dimères.

Les simulations les plus récentes de modèles J-Q avec symétrie $SU(2)$ (dont nous avons indiqué qu'ils devaient avoir une transition aussi capturée par l'Éq. (35)) ainsi que du modèle de boucles 3d [NAHUM15] trouvent quant à elles des exposants $\eta \sim 0.25 - 0.30$ [SANDVIK12, NAHUM15], et une estimation de l'exposant de la longueur de corrélation qui « glisse » (à cause de fortes corrections au scaling) d'une valeur $\nu \sim 0.6$ [SANDVIK10] vers $\nu \sim 0.5$ [HARADA13, NAHUM15] en augmentant la taille des systèmes.

Finalement, le scénario tricritique (Ginzburg-Landau ou non) peut être infirmé quant à lui

si l'on change le modèle sans changer les symétries de la phase basse température, et que l'on trouve une transition continue avec les mêmes exposants critiques que ceux observés pour le modèle de l'Éq. (26).

En résumé, pour permettre de trancher entre ces plusieurs scénarios, il semble intéressant de regarder des modèles de dimères sur réseau différents de celui de l'Éq. (26) afin de tester l'universalité des résultats obtenus jusque-là. C'est ce que nous faisons dans le [Chapitre VIII](#) suivant.

connu qu'il existe une transition continue dans la classe d'universalité du modèle 3d XY. C'est exactement ce qui est observé numériquement pour le modèle à un fondamental.

Les résultats sont moins directs et précis pour l'action $\mathcal{F}_{\text{col}}^{2/4f}(\mathbf{m}, T)$, mais permettent eux aussi de rendre compte des résultats numériques. L'action pour $\delta < 0$ (modèle à 4 fondamentaux) est identique à celle d'une théorie *easy plane* des PCQD pour laquelle les dernières simulations indiquent une transition faiblement du premier ordre [KUKLOV04,KUKLOV06], encore une fois en accord avec les résultats numériques obtenus sur le modèle à 4 fondamentaux. Pour $\delta > 0$, le Hamiltonien de liaisons fortes pour les monopoles possède deux minima non reliés par des symétries, ce qui rajoute une symétrie de type Ising (pour choisir un des deux fondamentaux) à briser, en plus de la transition de Higgs [CHEN09]. En principe, ces deux transitions sont indépendantes. Si elles arrivent simultanément, alors il est fort probable que la transition soit du premier ordre (sauf cas exceptionnel tricritique) : c'est de nouveau ce qui est observé numériquement pour le modèle à 2 fondamentaux.

Interpolation entre modèles

CHEN *et al.* [CHEN09] étudient aussi des modèles interpolant entre ceux à 1 et 2 fondamentaux

$$\text{Éq. (36)} \quad E_c^{1-2} = (1 - \lambda)E_c^1 + \lambda E_c^2,$$

ou entre ceux à 4 et 6 fondamentaux (c.-à-d. le modèle original)

$$\text{Éq. (37)} \quad E_c^{4-6} = (1 - \lambda')E_c^4 + \lambda'E_c^6$$

où E_c est l'énergie Éq. (26). Pour tout $0 < \lambda, \lambda' < 1$, ces deux modèles ont respectivement les symétries du modèle à 1 et 4 fondamentaux, et la théorie des champs [CHEN09] prédit donc une transition continue 3d XY pour le premier modèle Éq. (36) et propose une transition de phase du premier ordre pour le second Éq. (37).

Dans le cas du premier modèle, nous savons toutefois qu'il existe une transition du premier ordre à $\lambda = 1$, qui plus est assez forte [CHEN09] (avec par exemple une grande chaleur latente à la transition, soit une grande différence d'énergie entre les deux phases présentes à T_c). Il faut donc une perturbation $\delta\lambda = 1 - \lambda$ assez importante pour combler cette différence d'énergie, et on s'attend donc à une valeur $\lambda^c \neq 1$ pour un point multicritique où la transition continue du modèle à 1 fondamental devient du premier ordre. C'est effectivement ce qui est observé numériquement avec une estimation $\lambda^c \sim 0.95$.

Enfin, signalons que dans le modèle interpolé Éq. (37), il est observé que la différence d'énergie entre les deux phases au point critique (signalée par une discontinuité de l'énergie à T_c) qui est présente pour le modèle à 4 fondamentaux $\lambda' = 0$ diminue de plus en plus lorsque $\lambda' \rightarrow 1$, comme reporté dans la Fig. 55. Pour quantifier, on mesure la probabilité de distribution de l'énergie $P(E)$ à la transition, qui possède deux pics à des énergies distinctes. Il est possible numériquement [CHEN09] d'observer cette structure à deux pics (synonyme d'une transition du premier ordre) jusqu'à $\lambda' = 0.98$. On trouve que la différence d'énergie entre ces deux pics tend à s'annuler après extrapolation précisément au point $\lambda' = 1$ (bien qu'encore une fois, il soit toujours possible que le point $\lambda' = 1$ corresponde lui aussi à une transition du premier ordre avec une longueur de corrélation ξ^* supérieure à la taille des échantillons utilisés). Cette étude tend à indiquer que le point $\lambda' = 1$ correspondant au

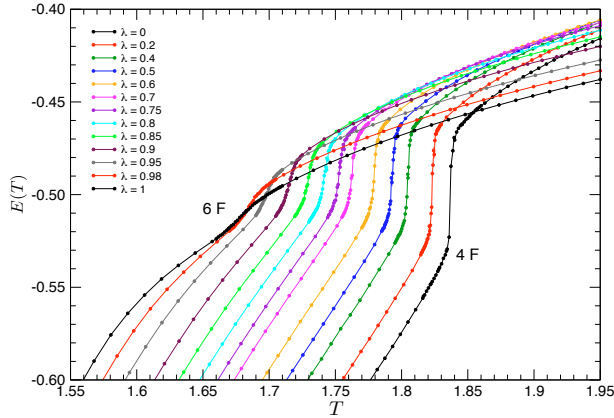


Fig. 55 Énergie en fonction de la température pour le modèle Éq. (37) pour différentes valeurs du paramètre λ , interpolant entre le modèle à 4 fondamentaux $\lambda = 0$ et celui à 6 fondamentaux $\lambda = 1$. La discontinuité à la transition de $E(T)$ présente pour le modèle à 4 fondamentaux s'estompe au fur et à mesure que $\lambda \rightarrow 1$. La taille de l'échantillon utilisé est $L=48$.

modèle original Éq. (26) est particulier.

Il est aussi possible de découpler la transition où la phase Coulombienne s'annule de celle où un ordre colonnaire apparaît. Le modèle

$$E_c^{xy} = v \left[N_e^c \left(\begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ \left[\begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \end{array} \right] \\ \downarrow \uparrow \end{array} \right) + N_e^c \left(\begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ \left[\begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \end{array} \right] \\ \uparrow \downarrow \end{array} \right) \right]$$

a été proposé à cet effet [CHEN09]. Pour $v = -1$, ce modèle a deux fondamentaux colonnaires, mais non reliés par une translation d'un pas du réseau. Il est observé numériquement que la phase Coulombienne disparaît lors d'une transition continue (dans la classe d'universalité du modèle 3d XY) à une température $T_c^2 \simeq 2.247$, distincte de la température $T_c^1 \simeq 1.795$ d'une transition du premier ordre où le système brise la symétrie discrète entre les deux fondamentaux. Entre les deux réside une phase liquide avec des corrélations dimère-dimère à courte portée. Ces deux transitions sont expliquées tant par la théorie duale des champs (Sec. VII.2.2 et Réf. [CHEN09]) que par le mapping vers un problème de bosons sur le réseau kagomé (Sec. VII.2.2 et Réf. [POWELL09]). En particulier, la transition à T_c^1 est interprétée comme une transition de ré-orientation (*spin-flop*), similaire à celle observée dans les systèmes magnétiques.

VIII.2. Extensions conservant la symétrie cubique

Les extensions du modèle de dimères présentées dans la Sec. VIII.1 ont permis de confirmer que l'analyse par l'Éq. (35) était valide et consistante pour ces extensions, mais ne permettent pas d'affirmer avec certitude sa pertinence pour le modèle original Éq. (26), en raison des arguments énoncés dans la Sec. VII.2.3. Notons toutefois que nous avons obtenu, grâce aux résultats sur le modèle extrapolé Éq. (37), une indication que le modèle Éq. (26) était semble-t-il singulier, car il se situait possiblement au bout d'une ligne de transitions du premier ordre.

Deux autres extensions plus directement reliées ont été proposées, qui mettent en compétition tous les termes de l'Éq. (26) avec des termes supplémentaires. Ces modèles respectent la symétrie cubique (contrairement à ceux présentés dans la Sec. VIII.1), et la phase basse température colonnaire, si existante, présente toujours les 6 fondamentaux de la Fig. 39 (on considère toujours le cas $v = -1$).

Perturbations à deux dimères

Dans une première étude, PAPANIKOLAOU et BETOURAS [PAPANIKOLAOU10] ont étudié les perturbations avec des termes comptant le nombre de paires de dimères parallèles séparés sur une même colonne, non plus par un pas de réseau comme dans le modèle Éq. (26), mais par deux ou trois pas du réseau :

Éq. (38)

$$E_c(v_2) = v_2 \left[N^c \left(\begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \end{array} \right) + N^c \left(\begin{array}{c} \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \end{array} \right) + N^c \left(\begin{array}{c} \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \end{array} \right) \right]$$

$$E_c(v_3) = v_3 \left[N^c \left(\begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \end{array} \right) + N^c \left(\begin{array}{c} \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \end{array} \right) + N^c \left(\begin{array}{c} \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \end{array} \right) \right]$$

Dans les deux cas, nous n'avons pas présenté pour des raisons de lisibilité toutes les configurations contribuant à l'énergie : les autres s'obtiennent par des opérations simples de symétrie. Considérons tout d'abord le cas de perturbations non frustrantes, c.-à-d. avec v_2 et v_3 du même signe de v et favorisant les mêmes fondamentaux colonnaires. À l'aide de simulations Monte Carlo, les auteurs de la Réf. [PAPANIKOLAOU10] établissent que pour $0.05 \leq v_2/v \leq 1$ (et $0.05 \leq v_3/v \leq 0.25$), la transition entre la phase Coulombienne et la phase colonnaire devient du premier ordre. Ils constatent de plus, comme c'était le cas pour le modèle extrapolé Éq. (37), que la différence entre les deux pics dans l'histogramme d'énergie à la transition tend à s'annuler lorsque v_2 et v_3 s'annulent.

Lorsque les termes $v_2 > 0$ entrent en compétition avec les termes $v = -1$ (interactions répulsives entre dimères reliés par les termes en v_2), ces auteurs trouvent une transition continue pour $v_2/v = -0.1, -0.2$ et -0.4 avec des exposants critiques $\eta \in [0, 0.25]$, $\alpha/\nu \in [0.75, 1.0]$, et par *hyperscaling* $\nu \in [0, 5, 0.53]$. Ces résultats peuvent être considérés compatibles avec les exposants critiques du modèle originel Éq. (26), bien que la gamme assez large de valeurs d'exposants critiques force à considérer cette compatibilité avec des pincettes. De plus, il est assez souvent assez difficile d'obtenir des estimations fiables des exposants critiques lorsque les tailles des échantillons étudiés sont trop petites (au maximum $L = 32$ dans la Réf. [PAPANIKOLAOU10], à comparer avec les tailles jusqu'à $L = 96$ de la Fig. 49 et jusqu'à $L = 140$ dans la Réf. [CHARRIER10] décrite ci-bas). En particulier, l'estimation de ν nous semble hasardeuse étant donnée qu'elle est déduite par hyperscaling de la divergence de la chaleur spécifique, qui est parfois difficile à estimer. En conclusion, ces résultats du côté frustrant des interactions n'apparaissent pas suffisamment conclusifs en eux-mêmes pour répondre aux questions de la Sec. VII.3, mais peuvent compléter les résultats présentés dans la section suivante.

Perturbation cubique

Dans un autre travail avec D. CHARRIER [CHARRIER10], une autre perturbation conservant la symétrie cubique a été étudiée : il s'agit cette fois-ci de compter les cubes élémentaires ayant quatre dimères parallèles

$$E_c(v_4) = v_4 \left[N^c(\text{cub1}) + N^c(\text{cub2}) + N^c(\text{cub3}) \right] \quad \text{Éq. (39)}$$

Décrivons le diagramme de phase de la Fig. 56 qui résume l'ensemble des résultats obtenus sur le modèle contenant à la fois les termes de plaquette v de l'Éq. (26) et ceux de perturbation cubique v_4 de l'Éq. (39). Dans le régime $v_4 < 0$ où l'interaction cubique favorise les fondamentaux colonnaires, les simulations indiquent une transition du premier ordre entre la phase Coulombienne et la phase colonnaire. Les signaux sont très clairs dans le régime $v_4/v > 0.2$, et on trouve une trace de deux pics dans la distribution de probabilités d'énergie $P(E)$ pour $v_4/v = 0.2$. Le cas $v_4/v = 0.1$ est incertain : il n'y a pas de signature explicite de transition du premier ordre.

Pour le signe différent $v_4 > 0$ des interactions cubiques, aucune trace d'une transition du premier ordre n'est trouvée. Deux régimes se distinguent pour décrire la transition continue observée : le premier à forte frustration $v_4/v \leq -1$ avec une certaine gamme d'exposants critiques et une autre pour une frustration modérée avec $v_4 > 0$ mais proche de 0.

Dans le régime de forte frustration, la chaleur spécifique par site C_v/N ne diverge pas ou alors que très faiblement (Fig. 57) au point critique : ceci est en contraste notable avec les résultats pour $v_4 = 0$ où C_v/N diverge linéairement avec la taille linéaire du système L (Fig. 53). Les exposants critiques sont estimés (par les mêmes méthodes que celles du Chapitre VI) aux valeurs suivantes $\nu \sim 0.6$ et $\eta \sim 0.2$, dans les deux cas bien différents de ceux trouvés pour le point $v_4 = 0$. L'estimation de l'exposant critique α est particulièrement difficile à cause d'une grande valeur de la partie régulière de C_v , mais la faible divergence de C_v indique une valeur faible $\alpha \in [0, 0.2]$. Par ailleurs, on remarque dans ce régime que si la

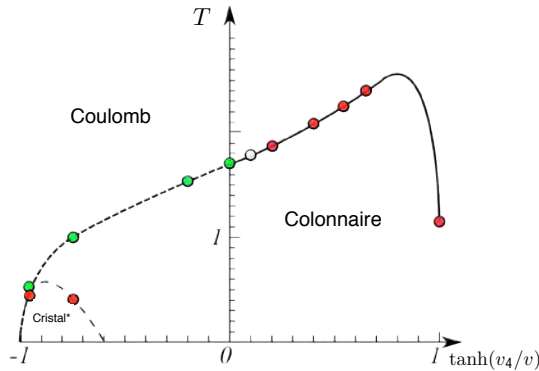


Fig. 56 Diagramme de phase pour le modèle avec perturbation cubique $v_4 - v$ (termes v_4 donnés par l'Éq. (26) et termes en v donnés par l'Éq. (39)). Ce diagramme de phase a été obtenu numériquement avec le même algorithme Monte Carlo de ver que celui utilisé dans le Chapitre VI.

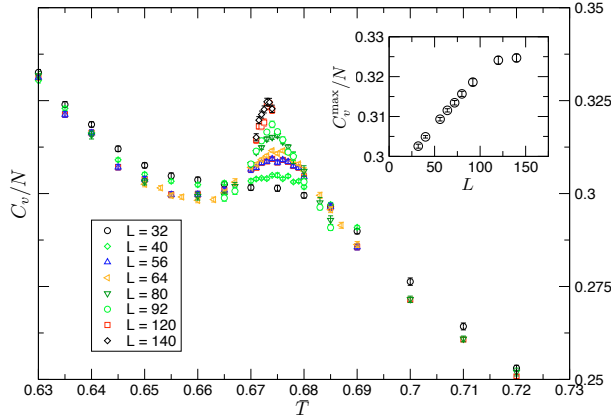


Fig. 57 Chaleur spécifique par site C_v/N en fonction de la température pour le modèle avec perturbation cubique $v_4 = 10$ et $v = -1$, pour différentes tailles de systèmes. Un pic se développe à la transition, mais qui ne semble pas diverger dans la limite thermodynamique (ou alors très faiblement). L'encart montre la variation lente, voire la saturation, du maximum de C_v/N en fonction de la taille linéaire du système.

frustration est trop forte, le fondamental change de nature et n'est plus colonnaire : il s'agit d'un autre cristal qui maximise le nombre de cubes ne contenant pas 4 dimères. La nature précise de cette phase (décrite dans la Réf. [CHARRIER10]) n'est pas très importante dans la mesure où on trouve toujours une phase colonnaire à plus haute température (sauf dans le cas marginal $v_4 = +\infty$ où il n'y a plus de transition). La transition Coulomb-cristal n'est pas affectée par l'existence d'une autre transition de phase (qui se révèle être du premier ordre) à plus basse température vers cette autre phase cristalline.

Dans le régime proche de $v_4 = 0$ et notamment pour $v_4 = 0.2$, on trouve [CHARRIER10] une classe d'universalité proche de celle du point $v_4 = 0$ correspondant au modèle non perturbé Éq. (26). Les estimations des exposants et amplitudes critiques sont données dans le Tab. 1.

v_4/v	α/ν	ν^{col}	ν^{Coulomb}	η	B_c	$(K^{-1} \cdot L)_c$
-10	0.4*	0.63(4)	0.63(4)	0.25(3)	1.28 - 1.30	0.16 - 0.20
-1	0.35(10)	0.60(4)	0.61(4)	0.16(6)	1.27 - 1.29	0.18 - 0.22
-0.2	0.80(15)	0.50(3)	0.58(4)	-0.02(5)	1.26 - 1.28	0.23 - 0.27
0	1.11(15)	0.51(3)	0.50(4)	-0.02(5)	1.26 - 1.28	0.26-0.29

Tab. 1 Exposants et amplitudes critiques pour différentes valeurs de la perturbation cubique $v_4 > 0$. Deux valeurs de ν sont données, selon que cet exposant ait été estimé par la dérivée thermodynamique du cumulatif de Binder (ν^{col}) ou de $K^{-1} \cdot L$ (ν^{Coulomb}) : voir Chapitre VI pour la procédure. Les valeurs des amplitudes critiques universelles pour ces quantités sont aussi reportées. Le symbole * dénote le cas particulier où la détermination de α/ν est quasiment impossible, à cause d'une trop forte contribution de la partie régulière de la chaleur spécifique.

Ces conclusions sur les classes d'universalité pourraient, comme toujours, être remises en question si le système révélait une transition de phase du premier ordre pour des tailles d'échantillon plus importantes que celles étudiées. Afin de parer à cette éventualité, une étude approfondie des effets conjugués de taille finie lors de la variation du paramètre v_4 a

été effectuée dans la Réf. [CHARRIER10], sous la forme de la technique du *flowgram* introduite dans la Réf. [KUKLOV06]. Sans rentrer dans les détails explicités dans la Réf. [CHARRIER10], l'idée est de relier le comportement critique d'une quantité invariante d'échelle sur un système de grande taille (pas forcément accessible numériquement) pour une valeur de v_4 à celui pour une autre valeur de v_4^* pour une taille plus petite (et donc bien contrôlable numériquement). Si ce lien (induit par une transformation d'échelle) est possible, cela indique que les deux valeurs de v_4 sont dans le même régime critique que l'on peut facilement déterminer (premier ou second ordre) sur le système de plus petite taille. Si ce n'est pas possible, alors les deux points se situent dans deux régimes différents et la nature de la transition doit changer. Les résultats de la Réf. [CHARRIER10] indiquent que deux « flots » de courbes bien distincts existent : un pour $-0.6 \leq v_4/v < 0.02$ (principalement dans le régime frustrant), et un pour $0.4 < v_4/v < 0.7$ (dans le régime clairement du premier ordre). Outre la confirmation indirecte que les transitions proche du point $v_4 = 0$ semblent appartenir à la même classe d'universalité, cette analyse permet d'affirmer que la transition à $v_4 = 0$ (celle du modèle original Éq. (26)) est bien continue. En effet, la technique flowgram prédit que si l'on souhaitait artificiellement relier ces deux flots de courbe (cela signifierait que toutes les transitions Coulomb-cristal sont du premier ordre), alors la transition du premier ordre (facilement repérée pour un système de taille linéaire $L = 32$ pour $v_4/v = 0.6$) serait identifiable à $L = 160$ pour $v_4 = 0$. Or, un calcul de la distribution de probabilité d'énergie $P(E)$ à T_c pour un système de taille record $L = 180$ ne montre aucune trace de double pic. Nous concluons donc avec la Réf. [CHARRIER10] que la transition à $v_4 = 0$ n'est donc *pas* du premier ordre.

Perturbation cubique en présence de monomères

G. SREEDITH et S. POWELL ont récemment étendu [SREEJITH14] l'étude du modèle Éq. (38) au cas de l'inclusion explicite d'une densité faible mais finie de monomères, dans l'idée de tester plus avant les propriétés du point critique sans monomères. Dans un premier temps, ces auteurs confirment les exposants critiques [CHARRIER10] obtenus sans monomères loin du point $v_4 = 0$ (en prenant $v_4 = -v$), tout en y rajoutant la mesure de l'exposant $y_z \simeq 2.42$ associée à la décroissance de la fonction de corrélation monomère-monomère au point critique : $\langle m(0)m(r) \rangle \sim r^{-2d+2y_z}$. Ils introduisent ensuite une fugacité finie z pour les monomères, et obtiennent le diagramme de phase de la Fig. 58. En présence de monomères, la phase Coulombienne est détruite et la transition vers la phase colonnaire devient une transition « ordinaire » ordre-désordre décrite par la théorie de Landau: il s'agit d'une transition $O(3)$ en présence d'anisotropie cubique (décrite par l'Éq. (31)), qui est faiblement du premier ordre [CARMONA00]. Toutefois, la présence proche du point critique à $z = 0$ influence la forme du diagramme de phase : en se basant sur une théorie de scaling [POWELL12,POWELL13] en présence d'un opérateur pertinent (ici l'insertion de monopoles), la Réf. [SREEJITH14] argumente notamment que la forme fonctionnelle $T_c(z)$ peut être décrite entièrement à l'aide de la connaissance de la

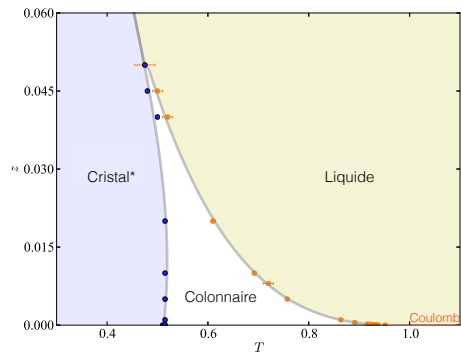


Fig. 58 Diagramme de phase du modèle $v_4 - v$ (avec $v_4 = -v = 1$), dopé par des monomères de fugacité z . Adapté de la Réf. [SREEJITH14].

dimension d'échelle y_z , calculée au point critique *sans* monomères. Les simulations numériques [SREEJITH14] confirment parfaitement cette prédiction.

VIII.3. Conclusion finale

En résumé, l'étude du modèle Éq. (39) fait se dessiner deux classes d'universalité différentes pour la transition Coulomb-cristal, avec une classe d'universalité « intrinsèque » (car loin de toute transition du premier ordre) avec des exposants $\nu \sim 0.6$, $\eta \sim 0.2$ et α faible voire nul, et une différente avec $\nu \sim 0.5$, $\alpha \sim 0.5$ et $\eta \sim 0$ dont le modèle original Éq. (26) serait représentatif. Bien qu'il existe des petites différences entre les valeurs des exposants ou des amplitudes critiques à l'intérieur de chacune de ces deux supposées classes d'universalité (cela semble difficile à éviter avec des simulations longues et difficiles sur des systèmes tridimensionnels), ce résultat semble robuste. À noter que l'exposant $\eta \sim 0.2$ est compatible avec la classe d'universalité trouvée pour le modèle Éq. (38) dans la Réf. [PAPANIKOLAOU10] (les comparaisons des autres exposants sont plus hasardeuses car elles dépendent toutes crucialement de la contribution de la partie régulière de la chaleur spécifique).

Comme déjà remarqué dans l'étude du modèle interpolé Éq. (36) et celle de la Réf. [PAPANIKOLAOU10], celle du modèle perturbé Éq. (39) indique que le point $v_4 = 0$ se trouve très proche d'une ligne de transition du premier ordre et d'une du second ordre. Il se pourrait donc qu'il s'agisse d'un point multicritique portant sa propre classe d'universalité, ou en tout cas qu'il s'en trouve suffisamment proche pour être influencé à travers des exposants effectifs notamment. Les simulations ne peuvent préciser la position exacte du point de séparation entre transitions du premier et du second ordre, puisque par exemple le point $v_4/v = 0.1$ ne présente pas de transition du premier ordre. Les exposants obtenus pour v_4 égal ou proche de 0 sont compatibles avec ceux d'un modèle $O(N)$ tricritique, ce qui était un des éléments initiaux qui faisait penser à l'existence de tricriticité.

Encore faudrait-il expliquer cette similarité, car il est important de rappeler que ces deux transitions de phase Coulomb-cristal continues (et les deux classes d'universalité observées numériquement) se situent en dehors du cadre théorique Ginzburg-Landau habituel. En effet, le fait que la transition Coulomb-cristal dans le régime de forte frustration (tant pour le modèle Éq. (38) que pour le modèle Éq. (39)) soit continue et loin de la ligne de transition du premier ordre ne *peut pas* être expliqué par le scénario Ginzburg-Landau tricritique de la Sec. VII.3.1. À ce titre, si le point $v_4 = 0$ est effectivement tricritique, il doit s'agir d'un point tricritique *non* Ginzburg Landau, dont on connaît encore moins la classe d'universalité. La même conclusion (d'une transition forcément non conventionnelle entre la phase de Coulomb et la phase colonnaire) est tirée de la variation de T_c avec le dopage en monomères [SREEJITH14], qui ne peut être expliquée dans le cadre d'une simple transition ordre-désordre à la Landau.

Le scénario « Higgs » de la Sec. VII.2 est certes exotique mais semble le seul qui puisse expliquer l'ensemble des données numériques sur les modèles de dimères. L'accord n'est pas encore entier avec les exposants critiques issus des simulations numériques de la discrétisation sur réseau de l'Éq. (35), bien que les exposants de la Réf. [MOTRUNICH08] $\nu = 0.7 - 0.75$ et $\eta = 0.2 - 0.4$ pour la transition Higgs « générique » et les estimations plus grossières $\nu \sim 0.5$ et $\eta \sim 0$ pour un point Higgs tricritique sont finalement proches de celles présentées ci-haut. En ce qui concerne les simulations de modèles J-Q de spins quantiques

en deux dimensions ou de modèle de boucles classiques en 3 dimensions, l'accord est tout aussi raisonnable avec la classe d'universalité à forte frustration, puisque ces simulations [SANDVIK12,PUJARI13,HARADA13,NAHUM15] trouvent $\eta \sim 0.25 - 0.30$ et $\nu \sim 0.5 - 0.6$ ¹³. La Réf. [SREJITH14] pousse la correspondance avec les PCQD encore plus loin en reliant la dimension d'échelle y_z de l'opérateur insertion de monomères (mesurée dans le modèle de dimères) avec l'exposant critique η_{VBC} associé aux corrélations du paramètre d'ordre VBC (mesuré dans les modèles J-Q). Cette relation $\eta_{\text{VBC}} = d + 2 - 2y_z$ peut être comprise car c'est bien la condensation de monopoles (monomères) qui crée l'ordre VBC dans la théorie des PCQD. La dimension d'échelle $y_z \simeq 2.3(1)$ mesurée dans le modèle avec perturbation cubique et en présence de monomères est tout à fait compatible avec la valeur η_{VBC} trouvée pour les modèles J-Q. Notons finalement qu'à ce jour, il n'a jamais été trouvé de point tricritique dans les modèles de type J-Q, qui permettrait une comparaison avec le modèle de dimères originel à $v_4 = 0$.

En conclusion de cette partie consacrée à l'étude de modèles de dimères classiques en trois dimensions, l'ensemble des données numériques indique que la transition Coulomb-colonnaire « générique » est bien un exemple d'une transition non conventionnelle avec un mécanisme de Higgs, décrite par l'Éq. (35) similaire à celle rencontrée dans les PCQD. Il apparaît simplement malheureux d'avoir historiquement étudié en premier le modèle Éq. (26) (sans perturbation cubique) car celui-ci est très proche d'un point tricritique, lui aussi non Ginzburg-Landau.

¹³ Il est possible que notre estimation de ν "glisse" elle aussi vers des valeurs plus basses avec l'accès éventuel à de plus grandes tailles

PARTIE 3 :

Autres résultats autour du magnétisme quantique & Perspectives de recherche

Les chapitres précédents ont présenté en détail mes travaux sur la physique des dimères classiques, qui n'ont constitué qu'une partie de mes activités récentes. Le [Chapitre IX](#) présente une synthèse de mes autres sujets de recherche, qui peuvent tous être regroupés dans la thématique de la théorie du magnétisme quantique et des corrélations fortes en physique de la matière condensée. Les descriptions ci-dessous sont plus synthétiques (je pointe vers des revues si elles existent), mais j'espère complètes tant au niveau des enjeux que des résultats.

Ces recherches sont en général indépendantes du problème des dimères classiques et cette partie peut donc être lue indépendamment. Toutefois, certains des thèmes de recherche évoqués peuvent être reliés aux parties précédentes, comme par exemple l'étude des points critiques quantiques déconfinés dans des modèles de spins quantiques ([Sec. IX.2](#)) ou de la physique des fonctions *Resonating Valence Bond* à courte portée ([Sec. IX.3.1](#)).

Le [Chapitre X](#) final présente mes perspectives de recherche pour les années à venir. Certains des projets mentionnés sont dans la continuation des recherches en magnétisme quantique présentés dans le [Chapitre IX](#). Outre ces projets, ce [Chapitre X](#) présente aussi un nouveau thème de recherche indépendant dans lequel j'ai commencé à m'investir : il s'agit du thème de la localisation à N corps (*Many Body Localization*). Ce chapitre contient une introduction succincte à ce problème récent en matière condensée et contient notamment les grandes questions du domaine auxquelles j'espère pouvoir apporter une réponse. Finalement, je présente les premiers résultats obtenus et les perspectives sur ce sujet qui va probablement occuper une grande partie de mes recherches dans les années à venir.

Chapitre IX. Résultats en magnétisme quantique

Le magnétisme quantique est un domaine actif de la matière condensée, notamment car il agrège les compétences des chimistes (qui préparent les échantillons), des physiciens expérimentateurs (pour les mesures directes des propriétés magnétiques) et théoriciens (qui formulent, analysent ou simulent des modèles théoriques pour ces matériaux). À basse dimension, faible température et/ou en présence de frustration magnétique, les fluctuations quantiques sont exacerbées et conduisent à des phénomènes de mise en ordre inhabituels, voire d'absence d'ordre. Leur étude théorique est rendue complexe par la difficulté intrinsèque du problème à N corps quantique mais aussi par la présence de compétition entre interactions. Pour résoudre ce type de problèmes, j'utilise souvent une approche numérique. La [Sec. IX.5](#) présente brièvement mes contributions dans ce domaine, mais je préfère insister sur les aspects physiques dans ce qui suit. La [Sec. IX.1](#) est consacrée à l'étude de plusieurs problèmes à basse dimension, souvent motivés par les expériences. La suite présente des problèmes plus fondamentaux que j'ai étudiés : points critiques quantiques déconfinés ([Sec. IX.2](#)), physique des liens de valence ([Sec. IX.3](#)) et relation entre matière condensée et information quantique ([Sec. IX.4](#)).

IX.1. Magnétisme quantique en basse dimension et modélisation quantitative

Les outils de simulations numériques ([Sec. IX.5](#)) que j'utilise sont adaptés pour décrire, souvent sans approximation, la physique de systèmes magnétiques en basse dimension. J'effectue une sélection ci-dessous de certains résultats obtenus, qui ont très souvent une motivation expérimentale.

Gap de spin dans des systèmes magnétiques de basse dimension

[ALHAJJ06,BRUNGER08,ARISTOV10]

J'ai étudié le gap de spin de deux systèmes magnétiques de basse dimension, portant tous les deux des spins $1/2$. Le premier système est constitué de rubans finis de polyacènes, qui peuvent être vus comme les analogues organiques des composés cuprates. La motivation vient ici de la chimie quantique : il a été en effet montré [SAID84] que les électrons π des hydrocarbures conjugués, bien que non sujets à des corrélations fortes, pouvaient être correctement traités à l'aide d'un Hamiltonien effectif d'Heisenberg pour des spins $1/2$

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

prototype de la description de systèmes magnétiques. Nous nous sommes intéressés dans ce domaine à une conjecture formulée par J.-P. MALRIEU il y a une vingtaine d'années, qui indiquait que le spectre de tels rubans était gappé ou non, selon la parité du nombre n_w de cycles benzéniques ([Fig. 59](#)). Il était déjà établi que le ruban avec un cycle benzénique $n_w = 1$ possède un gap de spin $\Delta \simeq 0.11J$. En collaboration

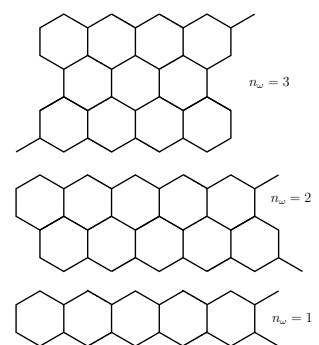


Fig. 59 Réseaux de polyacènes à n_w cycles benzéniques.

avec le groupe de J.-P. MALRIEU [ALHAJJ06], nous avons pu établir la validité de cette conjecture avec des calculs Monte Carlo quantique (MCQ) en montrant que le ruban à deux cycles $n_w = 2$ était sans gap, alors que le ruban à trois cycles $n_w = 3$ possède quant à lui un gap, certes petit, mais fini $\Delta \simeq 0.016J$. À noter ici l'importance de la précision du MCQ qui est la seule technique permettant de trancher ce dernier cas, étant donnée la faible valeur du gap. Le second système étudié est le modèle de Heisenberg sur une échelle à deux montants inégaux, modèle communément dénoté *Spiral Staircase*, car il peut être vu comme une déformation d'une échelle à deux montants où la constante d'échange d'un montant est modulée de façon périodique. Le Hamiltonien s'écrit :

$$H = J_{\parallel} \sum_i \left(\hat{\mathbf{S}}_{1,i} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{1,i+1} + \cos^2(\theta/2) \hat{\mathbf{S}}_{2,i} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{2,i+1} \right) + J_{\perp} \sum_i \hat{\mathbf{S}}_{1,i} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{2,i}$$

Ce modèle permet d'interpoler entre la physique de l'échelle isotrope (pour $\theta = 0$) et celle du réseau Kondo (modèle *Kondo necklace* pour $\theta = \pi$). Cette géométrie pour $\theta = 0$ correspond à celle de l'organique biradical PNNNO [HOSOKOSHI99], et il est possible que ce modèle pour $0 < \theta < \pi$ soit réalisé dans la famille des chaînes moléculaires décorées par des radicaux magnétiques.

En collaboration avec le groupe de F. ASSAAD [BRUNGER08,ARISTOV10], nous avons étudié ce modèle lorsque le couplage interchaîne est ferromagnétique. Par le calcul de gap de spin et du paramètre d'ordre *string* adapté, j'ai montré que cette échelle se situait dans une phase de Haldane avec gap de spin pour toute valeur de l'angle de *twist* θ et du couplage interchaîne J_{\perp} . Dans le régime de couplage faible $J_{\perp} \ll J_{\parallel}$, nous observons de plus l'apparition d'une nouvelle échelle d'énergie pour $\theta > \theta_c \sim 8\pi/9$. Cette échelle d'énergie, de type Suhl-Nakamura [SUHL58,NAKAMURA58] (très similaire aux interactions effectives RKKY dans les systèmes métalliques), modifie les caractéristiques à grande longueur d'onde du système. En particulier, nous avons montré que le gap de spin ne suivait plus un régime linéaire $\Delta \simeq J_{\perp}$ à faible couplage interchaîne.

Cette échelle d'énergie Suhl-Nakamura se manifeste aussi dans la dynamique du système, ce qui la rend sondable expérimentalement par exemple par diffraction de neutrons. Sur le facteur de structure dynamique de spin représenté dans la Fig. 60, une bande de magnon étroite apparaît clairement à basse énergie pour $\theta = \pi$, capturant le poids spectral de la bande haute énergie présente pour l'échelle isotrope à $\theta = 0$.

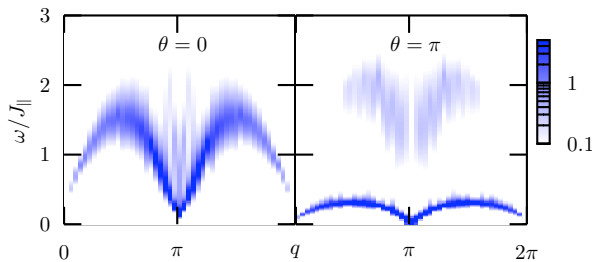


Fig. 60 Facteur de structure de spin dynamique $S(q, \omega)$ en fonction du vecteur d'onde q et de l'énergie ω , pour deux valeurs de l'angle de couplage $\theta = 0$ (échelle isotrope) et $\theta = \pi$ (*Kondo necklace*).

Impuretés magnétiques et non magnétiques dans une échelle de spins [ALEXANDER10]

J'ai étudié, en collaboration avec le groupe RMN d'Orsay (J. BOBROFF) et N. LAFLORENCIE, la physique du composé échelle de spins BiCu_2PO_6 en présence d'impuretés de spin non magnétiques (Zn remplaçant le Cu) et magnétiques (spin $S=1$ du Ni remplaçant le Cu) [ALEXANDER10]. Le composé pur possède des interactions magnétiques de type échelle de spins $S=1/2$, et présente un gap de spin d'environ 40K. Ce gap s'observe par la chute exponentielle de la susceptibilité magnétique bulk mais aussi dans le déplacement de Knight RMN du ^{31}P qui est proche des atomes de Cu portant le spin $1/2$. Une longueur de corrélation antiferromagnétique finie existe dans le système.

Les impuretés magnétiques ou non magnétiques constituent un outil formidable pour sonder la physique *bulk* dans ces systèmes à gap de spin en basse dimension, en regardant notamment le déplacement de la ligne RMN et la présence éventuelle de pics satellites, induits par la variation spatiale de l'aimantation locale proche de l'impureté. Dans les simulations, il est très clair (voir Fig. 61) qu'une aimantation alternée existe autour de l'impureté, avec une enveloppe exponentielle sur une échelle typique de la longueur de corrélation, ce qui permet de mesurer celle-ci.

La comparaison entre les simulation numériques Monte Carlo quantique que j'ai effectuées (avec N. LAFLORENCIE) et les spectres RMN expérimentaux permet en outre de préciser la nature de l'échange entre le Ni et les Cu voisins dans le cas du dopage magnétique. En effet, seul un couplage ferromagnétique entre ces spins permet de comprendre le doublement de la ligne RMN observé en présence de dopage Ni par rapport au dopage Zn.

Le système BiCu_2PO_6 présente par ailleurs probablement de la frustration, dont nous ne tenons pas compte dans les simulations, ce qui interdit une estimation précise du couplage Ni-Cu. Toutefois, des arguments qualitatifs simples indiquent que la frustration devrait

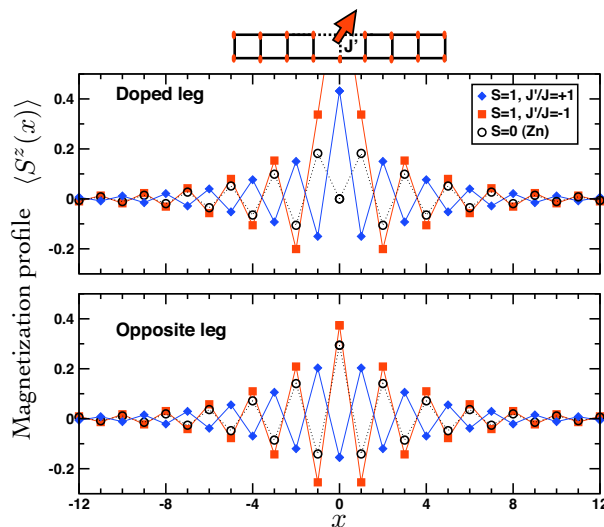


Fig. 61 Profil d'aimantation d'une échelle de spins $1/2$ dopée avec une impureté de spins S ($=0$ ou 1), en fonction de la distance avec l'impureté et du couplage entre l'impureté et les spins voisins, pour le montant où l'impureté est située (panneau du haut) ou le montant opposé (panneau du bas).

conduire à une augmentation du moment magnétique localisé proche de l'impureté, et qu'en conséquence ce couplage effectif devrait être important (de l'ordre du couplage Cu-Cu) et bien ferromagnétique.

Effets de dimensionnalités mixtes [NATH14]

En collaboration avec mes collègues expérimentateurs et théoriciens de Dresde, j'ai étudié la mise en ordre du composé antiferromagnétique CuP_2O_6 , où les atomes de Cu portent un spin $1/2$ [NATH14]. Ce composé présente la particularité de mélanger des unités de dimension mixte, avec une connectivité magnétique différente pour différents atomes de Cuivre : des chaînes de spins $1/2$ sont intercalées entre des plans carrés (Fig. 62). Les mesures de susceptibilité, d'aimantation et de RPE effectuées sur CuP_2O_6 indiquent une mise en ordre antiferromagnétique, avec une aimantation locale bien plus forte sur les plans que dans les chaînes (où celle-ci est parfois même non détectée expérimentalement). De plus, la température de Néel est bien plus faible que dans d'autres composés quasi-2d.

Assez étrangement, il n'existait jusque-là pas de théorie, même champ moyen, permettant de tenir compte de ce type de géométrie mixte. Une théorie RPA adaptée indique qu'il faut effectuer la moyenne géométrique des susceptibilités alternées. Combiné avec des calculs MCQ (donnant accès aux susceptibilités alternées) que j'ai effectués, cet argument simple permet d'expliquer la température de Néel relativement faible observée expérimentalement, ainsi que la mise en ordre partielle dans les chaînes.

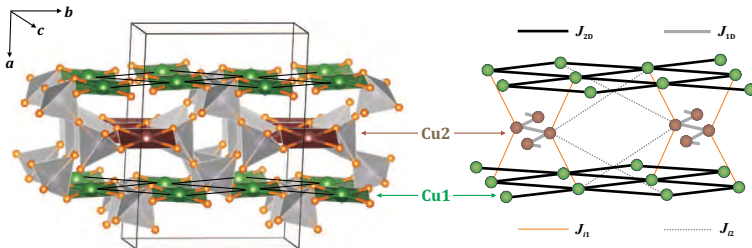


Fig. 62 Structure magnétique du composé CuP_2O_6 , où les seuls ions magnétiques Cu forment deux familles s'organisant en plans ou en chaînes. Figure tirée de la Réf. [NATH14].

Chaîne de spins 2 avec symétrie $\text{SO}(5)$

La physique des systèmes magnétiques unidimensionnels est très riche : les fluctuations quantiques jouent un rôle prédominant et peuvent stabiliser des phases exotiques de la matière. Un exemple célèbre est fourni par la chaîne de spins $S=1$ (chaîne de Haldane [HALDANE83]), qui pour un Hamiltonien de Heisenberg, présente une phase avec gap de spin caractérisée par un ordre caché [DENNIS89]. Celui-ci peut être compris en considérant un modèle étendu (avec terme biquadratique, ce qui est permis pour des spins 1) qui possède un fondamental exact représenté par un état produit de singulets locaux (et qui donne donc une façon simple de comprendre l'origine du gap de spin) [AFFLECK87].

En collaboration avec S. CAPPONI, I. McCULLOCH, H. NONNE et P. LECHEMINANT, j'ai étudié [ALET11] une chaîne de spins $S=2$ avec la même compétition entre termes bilinéaires et biquadratiques, mais possédant une symétrie plus étendue : $\text{SO}(5)$ au lieu de $\text{SU}(2)$.

La motivation ne vient pas de composés magnétiques isolants de Mott, mais cette fois-ci de la physique des gaz atomiques ultrafroids sur réseau optique. Il a été en effet montré [GORSHKOV10, CAZALILLA10] que des gaz fermioniques d'atomes alcalino-terreux (^{87}Sr par exemple) ou encore d'Ytterbium possédaient des Hamiltoniens effectifs avec des symétries étendues ($\text{SU}(N)$ ou $\text{SO}(N)$, difficilement réalisées dans les isolants de Mott) à cause d'un découplage quasi-parfait entre moments angulaires électroniques et spins nucléaires.

Nous avons montré que, contrairement au cas de la chaîne de Haldane, la chaîne $\text{SO}(5)$ en présence d'échange bilinéaire pure ne pouvait être comprise comme un état produit de singulets, mais présentait un ordre dimérisé très fort, brisant la symétrie du réseau (cas $\theta = 0$ dans la Fig. 63, avec $\tan(\theta)$ l'amplitude relative du terme biquadratique). J'ai caractérisé ceci en calculant en DMRG la variation spatiale du terme d'échange local pour des systèmes à conditions aux bords ouvertes. Outre les effets des conditions aux bords, on observe (panneau gauche de la Fig. 63) un très fort signal alterné de la corrélation locale, caractéristique de la phase dimérisée. Il faut recourir à un échange biquadratique plus fort (panneau de droite) pour retrouver une phase gapée mais non dimérisée, similaire à la phase de Haldane dans les chaînes de spins 1. Ces résultats numériques sont confirmés par une approche théorie des champs proposée par H. NONNE et P. LECHEMINANT. Nos résultats indiquent donc que la phase de Haldane nécessite un échange biquadratique assez fort (probablement difficile à obtenir dans les systèmes d'atomes froids) pour pouvoir être observée, dans le cas de la symétrie $\text{SO}(5)$.

Chaîne de spins 1 aperiodique [CASA GRANDE14]

Il existe d'autres façons de déstabiliser la physique de Haldane des chaînes de spins 1. La présence de désordre local (telle que procurée par des constantes de couplages aléatoires) peut détruire cette phase, pour donner place à une phase désordonnée de types singulets aléatoires (où les spins se couplent deux à deux en singulets, sur toutes les échelles de longueur) [FISHER94]. Il faut toutefois que le désordre soit assez fort pour « remplir » le gap de Haldane [HYMAN97]. Il est connu qu'une autre forme de variation locale de l'échange

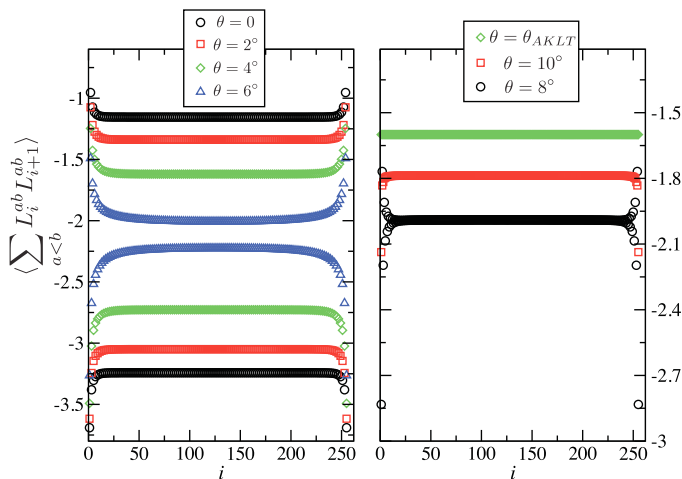


Fig. 63 Fonction de corrélation en fonction de la distance dans une chaîne de spins $\text{SO}(5)$ en fonction de l'intensité relative du couplage biquadratique $\tan(\theta)$. La phase à faible θ présente une forte dimérisation, la distinguant d'une phase gapée non dimérisée de type Haldane obtenue pour des plus grandes valeurs de θ .

permet d'avoir partiellement des effets similaires: il s'agit des chaînes apériodiques, où les constantes de couplages sont données par une séquence déterministe apériodique (la plus célèbre est la séquence de Fibonacci $a \rightarrow ab, b \rightarrow a$). Cette apériodicité est motivée par l'analogie avec les quasi-cristaux. Pour des chaînes de spins 1/2, l'apériodicité induit une transition directe vers une nouvelle phase dites de singulets apériodiques, très proche de la phase singulets aléatoires [VIEIRA05]. Cela peut se comprendre par un calcul de renormalisation dans l'espace réel (RSRG), typique des systèmes fortement corrélés désordonnés 1d (voir l'HDR de C. MONTHUS [MONTHUS04] pour une revue).

En collaboration avec H. CASA GRANDE, N. LAFLORENCIE et A. VIEIRA, j'ai entrepris de regarder la physique de la chaîne de spin 1 de Haldane, en présence d'une perturbation apériodique [CASA GRANDE14]. Les calculs RSRG effectués par mes collègues brésiliens se révèlent plus subtils et difficiles que pour les chaînes de spin 1/2, et suggèrent que le fondamental d'une chaîne de spin 1 apériodique peut présenter un comportement différent (à la fois du cas $S=1/2$, mais aussi de la chaîne de Haldane désordonnée). J'ai pu confirmé ces prédictions pour la chaîne de spin 1 modulée par la séquence de Fibonacci par des calculs DMRG, en montrant que le gap de Haldane ne se fermait jamais quelle que soit l'intensité de la modulation apériodique. Nos calculs montrent qu'une autre séquence apériodique (dite séquence 6-3) permet quant à elle de détruire la phase de Haldane. En l'absence de réalisation expérimentale, ces calculs restent de nature académique, mais présentent l'intérêt de préciser quelle est la bonne approche lorsque l'on veut effectuer une approche de renormalisation dans l'espace réel pour des systèmes avec des degrés de libertés locaux plus complexes que les cas généralement traités (spin 1/2, ou modèles *tight binding*).

IX.2. Points critiques quantiques déconfinés

Introduction au problème

Une autre partie de mes activités récentes de recherche a été constituée par l'étude numérique d'une transition de phase quantique non conventionnelle dans des modèles de spins quantiques sur des réseaux bidimensionnels, présentant des interactions en compétition. La transition en question est celle entre une phase antiferromagnétique de Néel et une phase cristal de liens de valence (*Valence Bond Crystal* ou VBC). Ces phases sont schématisées dans le diagramme de phase de la Fig. 64, avec les paramètres d'ordre correspondants, pour un réseau carré.

Ces deux phases en compétition possèdent des brisures de symétrie incompatibles : la phase de Néel brise la symétrie de spin $SU(2)$ et l'invariance par translation, la phase VBC brise spontanément l'invariance par translation et rotation, mais ne brise pas la symétrie de spin. La théorie de Landau des transitions de phases prédit alors une transition du premier ordre, mais il est maintenant établi numériquement pour une classe de modèles de spins que cette transition est du second ordre. Cette observation confirme les prédictions théoriques de SENTHIL *et al.* [SENTHIL04] qui avaient prévu en 2004 la nature continue de cette

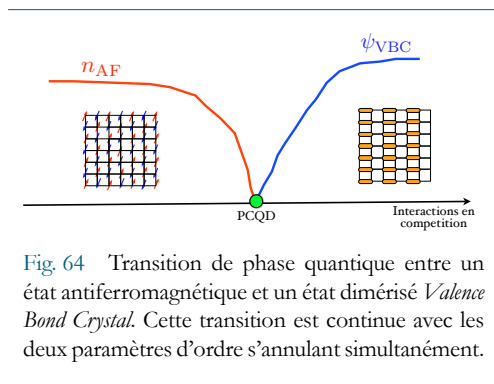


Fig. 64 Transition de phase quantique entre un état antiferromagnétique et un état dimérisé *Valence Bond Crystal*. Cette transition est continue avec les deux paramètres d'ordre s'annulant simultanément.

transition et indiqué qu'elle était décrite par une théorie différente de celle où il n'existe pas d'ordre cristallin. Nous avons déjà évoqué cette transition appelée point critique quantique déconfiné (PCQD), qui possède plusieurs aspects communs avec celle du modèle de dimères évoquée dans le [Chapitre VII](#) : elle ne rentre pas non plus dans le cadre de la théorie Ginzburg-Landau. La dénomination « déconfiné » vient du fait que la théorie des champs du point critique ne s'écrit pas en termes des paramètres d'ordres des deux phases (comme dans le point de vue usuel de la théorie de Landau), mais en ceux de nouveaux degrés de liberté émergents qui ne sont pertinents qu'au point critique. Ces degrés de liberté peuvent être interprétés comme des particules à nombres quantiques fractionnaires qui n'existent pas dans les deux phases autour du point critique et qui sont libérées uniquement au point critique : ils sont « déconfinés ».

Le cœur de l'argumentation de SETHIL *et al.* est le suivant [[SETHIL04](#),[SETHIL04B](#)] : dans une transition régulière entre un ordre de Néel et un état paramagnétique sans brisure de symétrie, la transition peut être vue comme causée par une prolifération de défauts topologiques dans l'ordre de Néel, les monopoles, qui condensent au point critique et détruisent ainsi l'ordre antiferromagnétique. Comme indiqué dans la [Sec. VII.2.4](#), le point crucial est que l'opérateur d'insertion de ces monopoles possède exactement les mêmes symétries que le paramètre d'ordre VBC. De même, LEVIN et SETHIL [[LEVIN04](#)] ont montré que les défauts topologiques dans l'ordre VBC créent identiquement l'ordre de Néel. Ces deux phases, apparemment non reliées, « communiquent » donc entre elles à travers leurs défauts topologiques respectifs.

Pour que la transition soit continue, SETHIL *et al.* argumentent que les monopoles doivent être non pertinents au point critique. Si c'est le cas, la théorie des champs devient non compacte, et est identique (aux termes d'anisotropie près) à l'Éq. (35). Alors que par construction les monopoles (monomères) sont interdits dans les modèles de dimères considérés précédemment, ceux-ci sont forcément présents dans les modèles de spins quantiques sur réseau. La situation est en partie sauvée par le fait que, sur le réseau carré, les effets d'interférences des phases de Berry des spins 1/2 annulent les effets des monopoles simples, doubles et triples [[HALDANE88](#)]. Les monopoles qui restent sont de type quadruple, et l'on peut espérer que l'opérateur d'insertion de ces événements rares (car quadruples) ait une dimension d'échelle suffisamment faible pour qu'il soit non pertinent au point critique. On peut montrer que c'est le cas pour des modèles à symétrie SU(N) pour $N \rightarrow \infty$ [[MURTHY90](#)] et $N = 1$ [[SETHIL04B](#)] : il apparaît alors raisonnable que c'est aussi le cas pour le cas physique $N = 2$. Toutefois, seules des simulations numériques peuvent le montrer.

Les modèles J-Q, qui mettent en compétition un terme d'échange d'Heisenberg (qui favorise l'ordre de Néel) et une interaction à 4 spins Q (qui favorise l'ordre VBC), ont été introduits par Sandvik [[SANDVIK07](#)] pour tester ce scénario :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} P_{ij} - Q \sum_{\langle i,j \rangle // \langle k,l \rangle} P_{ij} P_{kl}$$

où $P_{ij} = 1/4 - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ est le projecteur sur l'état singulet à deux spins, et où les quatre sites i, j, k et l sont pris autour d'une plaquette du réseau carré. On trouvera dans la revue Réf. [[KAUL13](#)] une introduction à ce type de modèles, qui présente les avantages importants de pouvoir être généralisés à la symétrie SU(N) et simulés par des méthodes Monte Carlo

quantique sans problème de signe. Les simulations les plus récentes [SANDVIK10,SANDVIK12,BLOCK13,HARADA13] montrent que la transition Néel-VBC est bien continue sur le réseau carré pour le modèle J-Q, validant donc le scénario PCQD. Toutefois des anomalies de scaling (par exemple drifts logarithmiques voire en faible loi de puissance dans les points de croisement de la rigidité de spin) sont observées numériquement pour N faible, et notamment $N = 2$ [SANDVIK10,KAUL11]. Un travail récent sur un modèle de boucles classiques en 3 dimensions présentant la même physique fait le point sur ces anomalies de scaling [NAHUM15] dans les modèles sur réseau.

C'est dans ce contexte que j'ai effectué plusieurs travaux contribuant à l'étude de ce nouveau type de points critiques, qui sont détaillés maintenant.

Sonder les points critiques quantiques par des impuretés [BANERJEE10,BANERJEE11]

Dans un premier temps et en collaboration avec A. BANERJEE et K. DAMLE, j'ai étudié la physique d'impuretés non magnétiques au voisinage de cette transition de phase quantique. Comme mentionné dans la [Sec. IX.1.2](#), les impuretés en matière condensée sont particulièrement utiles, tant au théoricien qu'à l'expérimentateur, pour sonder la physique d'un système corrélé. Généralement, ces impuretés modifient l'état physique en induisant des textures (de spin ou de charge), telles que celles visibles dans la [Fig. 61](#). Ces textures sont les réponses du système pur à l'introduction de l'impureté, et peuvent être mesurées par les sondes locales (comme la RMN ou le STM). Ces réponses donnent donc des informations précieuses sur la phase sous-jacente. En outre, les impuretés peuvent aussi révéler des ordres en compétition, par exemple en nucléant des domaines de cet autre ordre. Tout comme en RMN, il est possible dans les simulations de faire l'histogramme de l'aimantation locale en fonction de la distance à l'impureté. La stratégie est donc de simuler un système magnétique en présence d'un spin manquant, et cette situation est particulièrement adaptée pour le Monte Carlo quantique qui n'a pas besoin de l'invariance par translation pour être efficace.

La texture de spin $\langle S^z(\mathbf{r}) \rangle$ autour de l'impureté possède une composante uniforme $\phi^u(\mathbf{r})$ et une composante alternée $\phi^a(\mathbf{r})$ (avec le réseau bipartite), et l'on attend un comportement universel de ces composantes pour un point critique quantique conventionnel en dimension $(2+1)d$: $\phi^u(\mathbf{r}) = f^u(\mathbf{r}/L)/L^2$ et $\phi^a(\mathbf{r}) = f^a(\mathbf{r}/L)/L^{(1+\eta)/2}$, où η est l'exposant critique associé aux corrélations antiferromagnétiques critiques, et L la taille linéaire de l'échantillon. Pour des raisons techniques, il est pratique de considérer des relations similaires pour les transformées de Fourier de ces composantes: $\langle \tilde{\phi}^u(\mathbf{q}) \rangle = g^u(L\mathbf{q})$ et $\langle \tilde{\phi}^a(\mathbf{q} + (\pi, \pi)) \rangle = g^a(L\mathbf{q}) \cdot L^{(3-\eta)/2}$, valides pour $|\mathbf{q}| \leq \pi/2$. Ces formes prédisent qu'au point critique, les courbes correspondantes à différentes tailles devraient s'effondrer les unes sur les autres quand représentées en fonction de $|\mathbf{q}| \cdot L$. Alors que c'est le cas dans nos simulations d'un point critique quantique conventionnel (transition Néel - paramagnétique), ce n'est *pas* le cas pour le point critique du modèle J-Q avec une symétrie SU(2) [BANERJEE10]. La seule façon de réconcilier les données numériques (obtenues sur des systèmes de grande taille, jusqu'à 128^2 spins $1/2$) est d'inclure des corrections logarithmiques aux lois d'échelle attendues. De telles corrections logarithmiques sont la signature typique d'un opérateur marginal en théorie des champs. Cette observation confirme donc celle d'autres corrections logarithmiques dans des quantités thermodynamiques bulk (telles que la susceptibilité magnétique ou la rigidité de spin) observées quasi-simultanément [SANDVIK10]. Dans un travail suivant, nous avons montré [BANERJEE11] que les corrections logarithmiques

disparaissent si l'on étendait la symétrie du modèle de $SU(2)$ à $SU(3)$. L'ensemble de ces résultats sur les textures de spin confirme donc les anomalies de scaling observées pour le PCQD du modèle J-Q avec une symétrie $SU(2)$.

Transition sur le réseau hexagonal [PUJARI13,PUJARI15]

Nous nous sommes par la suite intéressé (collaboration avec K. DAMLE et S. PUJARI) à un problème similaire sur le réseau hexagonal (modèle J- Q_3), où cette fois-ci l'interaction d'échange est en compétition avec un terme à 6 corps $P_{ij}P_{kl}P_{mn}$ autour d'un hexagone [PUJARI13]. Le terme à 6 corps favorise un état VBC colonnaire de type Kekulé, représenté par des liens pleins sur la Fig. 65 : par analogie, on pourrait s'attendre à la même physique (transition Néel-cristal continue) que pour le réseau carré. Cependant, le traitement du réseau hexagonal se révèle plus subtil, car il permet des défauts topologiques particuliers (monopoles triples) interdits sur le réseau carré par interférence destructive des phases de Berry, comme décrit précédemment.

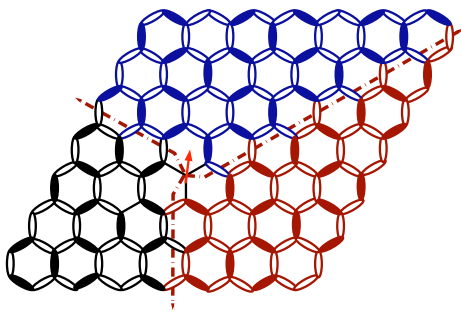


Fig. 65 Un spin $1/2$ est libéré à l'intersection de 3 domaines VBC colonnaire sur le réseau hexagonal, représenté par des liens forts résonant autour des hexagones.

De manière duale [LEVIN04], cela peut se voir sur la Fig. 65 où un défaut topologique (portant un spin $1/2$) est représenté, à l'intersection de 3 murs de domaines cristallins. Alors que dans le cas des monopoles quadruples, les limites $N = 1$ et $N \rightarrow \infty$ des théories des champs concordent pour indiquer que les monopoles quadruples sont non pertinents, ce n'est *pas* le cas pour les monopoles triples : ils sont pertinents dans la limite $N = 1$ et conduisent à une transition du premier ordre (ils sont aussi non pertinents dans la limite $N \rightarrow \infty$). Il apparaît donc bien moins évident que le réseau hexagonal puisse lui aussi présenter une transition continue entre un antiferromagnétique et un cristal de liens de valence.

Nos calculs Monte Carlo quantique [PUJARI13] révèlent toutefois que la transition Néel-VBC est continue, dans la même classe d'universalité que celle sur le réseau carré. Un extrait de nos calculs est donné dans la Fig. 66, où les cumulants de Binder de l'ordre de Néel et de l'ordre VBC se croisent pour la même valeur de Q_3 (dans les barres d'erreur). Nous démontrons ainsi le rôle inopérant des défauts topologiques (monopoles triples) à la transition, ce qui a été confirmé par un autre groupe dans la Réf. [HARADA13].

Outre cet intérêt théorique sur le rôle des défauts topologiques, nos résultats ont plusieurs conséquences pour des réalisations concrètes des points critiques quantiques déconfinés. En effet, la géométrie hexagonale est plus favorable que celle carrée pour observer cette physique, et ceci pour deux raisons. Premièrement, des études numériques récentes [ZHU13,GANESH13,GONG13] indiquent que la première phase induite par un couplage frustrant J_2 dans le modèle d'Heisenberg sur le réseau hexagonal est un cristal de liens de valence : la transition depuis la phase de Néel (présente à faible J_2) doit donc être la même que celle observée dans notre modèle. Le modèle J_1 - J_2 étant plus réaliste que le modèle J- Q_3 (qui demande des interactions à 6 corps), il est tout à fait envisageable qu'un isolant de Mott antiferromagnétique réalisant cette physique soit prochainement synthétisé ou découvert.

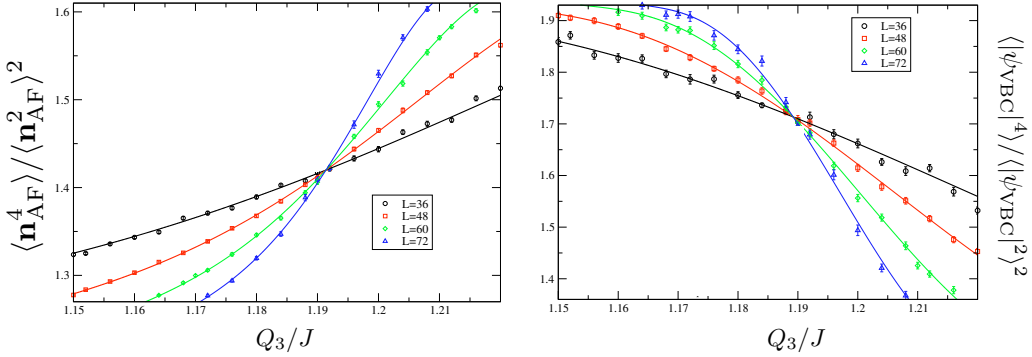


Fig. 66 Cumulants de Binder du paramètre d'ordre antiferromagnétique (gauche) et de celui VBC (droite) pour le modèle J - Q_3 sur le réseau hexagonal. Le croisement des cumulants pour différentes tailles de systèmes se situe à la même valeur de Q_3 (dans les barres d'erreur), signalant un point de transition continue unique.

Par comparaison, la phase induite par le même couplage frustrant J_2 sur le réseau carré n'est toujours pas bien comprise (liquide de spins ? Avec ou sans gap ? VBC ?), malgré plus de 20 années d'études. Le deuxième intérêt vient de la proposition récente de LEE et SACHDEV [LEE14], qui suggère d'induire une phase liens de valence Kekulé par l'application d'un champ électrique sur une bicouche de graphène (soumise à un champ magnétique modéré, ce qui induit de l'antiferromagnétisme). La transition induite par le champ électrique devrait là-aussi être de type continue et déconfinée.

Nous avons complété l'étude du modèle J - Q_3 sur le réseau hexagonal, en rajoutant une nouvelle échelle d'énergie Q_2 pour un terme à quatre spins qui favorise un VBC alterné (*staggered*) sur le réseau hexagonal [PUJARI15]. La motivation était de comprendre si la compétition entre les deux types de cristaux VBC (colonnaire et alterné) pouvait conduire à une phase liquide de spins, ou peut-être de façon plus exotique à une région de paramètres avec un winding variant continûment [FRADKIN04]. Il n'en est rien, puisque même lorsque $Q_2, Q_3 \gg J$ et $Q_2 \sim Q_3$, la phase de Néel ressurgit [PUJARI15]. Lorsque Q_2 domine, on a une transition de phase qui devient du premier ordre vers la phase VBC alternée. Un autre intérêt de cette étude est qu'elle a permis de tester l'universalité de la transition Néel-VBC colonnaire sur le réseau hexagonal : en faisant varier Q_2 (qui reste faible), nous avons pu déterminé que les exposants critiques étaient les mêmes que lorsque $Q_2 = 0$.

Modèles d'Heisenberg $SU(N)$ avec N réel [BEACH09]

Par ailleurs, j'ai étudié en collaboration avec K. BEACH, M. MAMBRINI et S. CAPPONI [BEACH09] un modèle quantique présentant lui aussi une transition Néel-VBC : il s'agit du modèle de Heisenberg à symétrie étendue $SU(N)$, qui correspond à un modèle antiferromagnétique de spins S (avec $N=2S+1$). La transition est cette fois-ci observée en changeant N : pour $N=2$ (soit $S=1/2$), le modèle est ordonné antiferromagnétiquement alors que l'ordre de Néel disparaît au profit de la phase cristalline VBC lorsque N devient grand [READ89]. Grâce à des astuces algorithmiques dans la méthode Monte Carlo quantique dans la base de liens de valence [SANDVIK05], il est possible de traiter N (ou S) continûment dans les simulations. Ceci nous a permis de détecter une transition de phase quantique continue entre les phases Néel et VBS pour $N_c \simeq 4.57$. Cette transition, bien que semblant entourée par les phases adéquates, ne peut être décrite par la théorie de SENTHIL *et al.* [SENTHIL04] car la symétrie du

modèle au point critique est mal définie. Il faut aussi avouer que cette transition a peu de chances d'être observée expérimentalement (on ne peut changer continûment la valeur du spin !). Toutefois, il est clair qu'en modifiant légèrement des paramètres du modèle (par exemple en couplant des chaînes), la valeur critique sera modifiée pour se rapprocher de valeurs entières. Une transition apparemment continue est ainsi observée par HARADA *et al.* [HARADA07] dans un modèle de chaînes de spin 1 couplées avec une symétrie SU(3), mais il faut noter dans ce cas que la symétrie de la phase VBC n'est pas la même que sur le réseau carré (la symétrie par rotation étant explicitement brisée pour des chaînes couplées).

Revue pédagogique sur les états et phases exotiques de la matière [ALET05B]

Avec A. WALCZAK et M. FISHER, j'ai écrit un article de revue [ALET05B] à caractère pédagogique sur les phases non conventionnelles de la matière qui peuvent se rencontrer dans les systèmes fortement corrélés. Les corrélations fortes peuvent rendre caduques deux piliers traditionnels de la matière condensée : les théories de Landau du liquide de Fermi et des transitions de phase. Cette revue évoque de façon simple les points critiques quantiques déconfinés, mais inclue aussi une présentation du théorème de Hastings ou d'exemples récents de liquides de spins topologiques et algébriques.

IX.3. Physique des liens de valence

A l'occasion de mon arrivée au CNRS en 2005, j'ai commencé un nouveau thème de recherche, qui concerne la description des états antiferromagnétiques par une approche liens de valence (*Valence Bond*). Les liens de valence sont des singulets à deux spins $1/\sqrt{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$, et les états liens de valence possèdent la propriété de former une base du secteur singulet de tout système de spins 1/2. On s'attend [LIANG88] à ce qu'ils puissent ainsi décrire des physiques radicalement différentes selon leur portée typique dans un état donné : « liquides de spins » (voir discussion plus bas) pour des liens de valence courts, ou ordre antiferromagnétique pour des liens à plus longue portée. D'un point de vue technique, la base des liens de valence est non orthogonale et massivement surcomplète, ce qui semble rendre une approche numérique plus complexe. Toutefois, ces propriétés peuvent être mis à profit pour créer des algorithmes Monte Carlo quantique efficaces de type projecteur pour échantillonner le fondamental singulet de systèmes antiferromagnétiques [SANDVIK05,SANDVIK10B]. J'ai développé ce type de méthodes [ALET09,BEACH09], et ai pu remarquer que cette base donnait accès à certaines propriétés du fondamental, difficiles à obtenir dans la base classique S^z . C'est en particulier le cas pour des quantités typiques de l'information quantique, telles que la fidélité (voir Sec. IX.4.1) ou l'entropie d'intrication de liens de valence (décrite Sec. IX.3.3).

Je donne par la suite plusieurs exemples de résultats obtenus sur la physique des liens de valence. Une introduction bien plus détaillée à la base liens de valence et à son traitement numérique peut être trouvée dans la thèse de D. SCHWANDT [SCHWANDT11].

États RVB et liquides de spins (mais pas ceux que l'on croit) [ALBUQUERQUE10B, ALBUQUERQUE12]

La théorie de Landau permet de classer les états de la matière, à travers les notions de brisure spontanée de symétrie et de paramètre d'ordre. Que faire lorsqu'un système ne brise aucune symétrie, même à température nulle (d'un point de vue théorique), ou à la plus basse température accessible expérimentalement ? Dans le cas des systèmes magnétiques,

on parle de liquides de spins, et depuis de nombreuses années, de nombreux efforts théoriques et expérimentaux ont été fournis pour comprendre et caractériser ces états exotiques de la matière. J'ai récemment revisité ce qui a été considéré pendant longtemps comme le prototype le mieux compris d'un liquide de spins, la fonction d'onde RVB (*Resonating Valence Bond*) introduite par ANDERSON [ANDERSON73], et considérée dans le cas de liens aux plus proches voisins sur le réseau carré par SUTHERLAND [SUTHERLAND88]. Cette fonction d'onde s'écrit comme la superposition linéaire de tous les pavages c d'un réseau donné par des singulets à deux sites :

$$|\Psi_{\text{NNVB}}\rangle = \sum_c |c\rangle$$

On remarquera bien sûr que le pavage de la Fig. 67, où chaque flèche correspond à l'appariement en singulet $1/\sqrt{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ de deux spins proches voisins, est géométriquement identique à celui d'un pavage de dimères, comme étudié dans les chapitres précédents. Le singulet à deux spins est d'ailleurs communément appelé dimère. Étant donnée l'importance des contraintes géométriques dans la physique des dimères, on peut donc s'attendre à retrouver une certaine partie de cette physique dans la fonction d'onde $|\Psi_{\text{NNVB}}\rangle$. Il faut toutefois d'assurer de bien prendre en compte la mécanique quantique des singulets $1/\sqrt{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$.

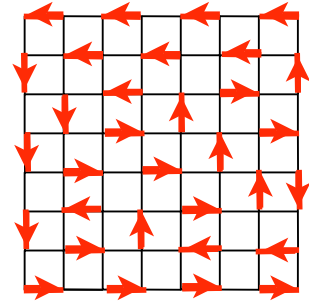


Fig. 67 Exemple d'un pavage du réseau carré par des singulets à deux sites aux plus proches voisins.

L'intuition derrière la fonction d'onde $|\Psi_{\text{NNVB}}\rangle$ est double : (i) l'appariement en liens de valence à courte portée devrait empêcher la formation d'antiferromagnétisme (puisque le singulet a un spin total $S=0$), et (ii) la résonance induite par la somme sur tous les pavages devrait interdire la cristallisation des singulets en un état ordonné. Un modèle stabilisant cette fonction d'onde dans son fondamental devrait alors présenter un gap dans son spectre à la fois pour les états magnétiques $S \geq 1$ et non magnétiques $S=0$.

- **Fonction d'onde RVB sur le réseau carré**

J'ai revisité ce point de vue avec F. ALBUQUERQUE, en calculant par Monte Carlo les corrélations à deux et à quatre spins dans la fonction d'onde $|\Psi_{\text{NNVB}}\rangle$ sur le réseau carré [ALBUQUERQUE10B]. Nous retrouvons effectivement le premier résultat intuitif (et connu depuis les travaux de la Réf. [LIANG88]), à savoir une longueur de corrélation antiferromagnétique finie et faible $\xi \simeq 1.35$. La surprise vient de la fonction de corrélation à quatre spins (dite « dimère-dimère ») $\langle (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)(\mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_l) \rangle - \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle \langle \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_l \rangle$ lorsque les spins i,j et k,l sont voisins deux à deux. Dans ce cas, nous trouvons une décroissance algébrique (avec un exposant 1.15 proche de l'unité) en fonction de la distance entre paires : il s'agit d'un quasi-ordre de singulets, ce qui était inattendu dans le contexte des fonctions RVB. Ceci peut s'observer sur la Fig. 68, qui présente cette fonction de corrélation multipliée par une loi de puissance de façon graphique (avec i,j le lien de référence en noir). Nous avons exhibé ainsi un nouveau type de liquide de spins, qui présente à la fois un gap de spin (puisque il n'y a pas d'ordre antiferromagnétique à longue portée), mais sans gap pour les excitations non magnétiques. Nos résultats ont été confirmés par un autre groupe dans une étude quasi-simultanée [TANG11].

Effectuons la connexion entre ce résultat et ceux présentés dans le Chapitre II. Pour

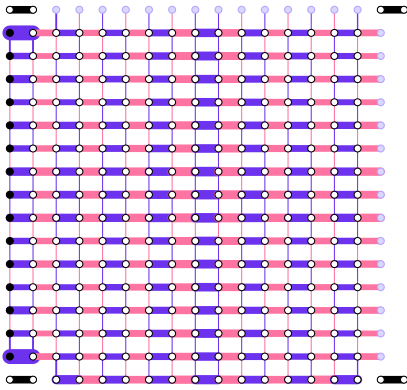


Fig. 68 Représentation spatiale de la fonction de corrélation « dimère-dimère » multipliée par la distance r à un dimère de référence (en noir), pour la fonction $|\Psi_{\text{NNVB}}\rangle$ sur le réseau carré. L'intensité de la corrélation est indiquée par l'épaisseur du trait, sa couleur indiquant le signe. Ce résultat indique un quasi-ordre colonnaire de dimères, avec une loi de puissance proche de l'unité.

cela, considérons la généralisation à la symétrie $SU(N)$ de la fonction d'onde $|\Psi_{\text{NNVB}}\rangle$ (un singulet à deux sites $SU(N)$ s'écrit $|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=(1-N)/2}^{(N-1)/2} (-)^{m-(N-1)/2} |m\rangle \otimes |-m\rangle$).

Toute fonction de corrélation peut s'écrire dans un formalisme de gaz de boucles obtenues en superposant deux pavages de dimères, avec une fugacité $2N$ par boucle provenant du recouvrement entre singulets¹⁴ [SUTHERLAND88]. Dans la limite $N \rightarrow \infty$, les deux pavages doivent être identiques, afin de maximiser le nombre de boucles, et on a simplement un problème constitué par deux pavages de dimères « classiques », dont les corrélations dimère-dimère décroissent avec un exposant $\alpha_d = 2$. En faisant une expansion systématique en $1/N$ autour de cette limite, DAMLE *et al.* [DAMLE12] montrent que le problème de la fonction $|\Psi_{\text{NNVB}}\rangle$ avec symétrie $SU(N)$ peut s'exprimer comme celui d'un problème de dimères classiques en interaction. Les premiers termes dans l'expansion (correspondant aux premières boucles de taille 4)

correspondent précisément à l'interaction attractive entre dimères d'une même plaquette étudiée dans les Chapitre II et Chapitre III ! On peut alors exporter la phase critique haute température (avec un exposant de dimères variant continûment) à la fonction $|\Psi_{\text{NNVB}}\rangle$ avec symétrie $SU(N)$. L'accord entre ce développement à grand N est très bon, même pour $N=2$ pour laquelle cette théorie prédit pour les corrélations dimère-dimères quantiques une décroissance algébrique avec un exposant 1.22, très proche du résultat des simulations numériques directes. Ce développement devient encore meilleur pour des valeurs plus grandes de N (étudiées numériquement dans la Réf. [STEPHAN13]), et a été également formulé sur le réseau hexagonal [PATIL14].

La fonction d'onde RVB hérite donc des propriétés critiques des pavages de dimères sur les réseaux bidimensionnels bipartites. Pour des réseaux bidimensionnels non bipartites (triangulaire, kagome), il a été par contre montré [WILDEBOER12, YANG12, SCHUCH12] que la fonction RVB aux plus proches voisins était bien un liquide de spins (de type Z_2), comme on pouvait s'en douter connaissant la physique des pavages de dimères non bipartites.

- **Fonction d'onde RVB sur les réseaux 3d bipartites**

J'ai par la suite montré en collaboration avec F. ALBUQUERQUE et R. MOESSNER que la situation devenait encore plus surprenante [ALBUQUERQUE12] lorsqu'on considérait la même fonction d'onde sur un réseau 3d, tel que le réseau cubique simple. Nos résultats Monte Carlo montrent très clairement (voir Fig. 69) que toutes les intuitions développées sur cette fonction d'onde tombent à l'eau en trois dimensions : la fonction d'onde $|\Psi_{\text{NNVB}}\rangle$ présente de l'ordre antiferromagnétique à longue portée, ce qui est contre-intuitif. De plus, les fonctions de corrélations « dimère-dimère » sont dipolaires, décroissant avec la distance comme

14 Le facteur 2 vient du fait qu'une boucle peut être obtenue de deux façons différentes, sauf pour les boucles de taille deux qui ont simplement une fugacité N